



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN

Simulación del Campo de Flujo Interdigital en
una Batería de Flujo Redox.

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

INGENIERO QUÍMICO

P R E S E N T A

JORGE DAVID MENDIZABAL RUIZ

ASESOR DE TESIS:

DR. ELIGIO PASTOR RIVERO MARTÍNEZ

CUAUTITLÁN IZCALLI, ESTADO DE MÉXICO, 2022.



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE
MÉXICO

DR. DAVID QUINTANAR GUERRERO
DIRECTOR DE LA FES CUAUTITLÁN
PRESENTE

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN
SECRETARÍA GENERAL
DEPARTAMENTO DE TITULACIÓN

FACULTAD DE ESTUDIOS
SUPERIORES CUAUTITLÁN

ASUNTO: VOTO APROBATORIO



ATN: DRA. MARIA DEL CARMEN VALDERRAMA BRAVO
Jefa del Departamento de Exámenes Profesionales
de la FES Cuautitlán.

Con base en el Reglamento General de Exámenes, y la Dirección de la Facultad, nos permitimos comunicar a usted que revisamos la: **Tesis y Examen Profesional**

Simulación del Campo de Flujo interdigital de una Batería de Flujo Redox.

Que presenta el pasante: **Jorge David Mendizabal Ruiz**
Con número de cuenta: **311038183** para obtener el título de: **Ingeniero Químico**

Considerando que dicho trabajo reúne los requisitos necesarios para ser discutido en el **EXAMEN PROFESIONAL** correspondiente, otorgamos nuestro **VOTO APROBATORIO**.

ATENTAMENTE
"POR MI RAZA HABLARÁ EL ESPÍRITU"
Cuautitlán Izcalli, Méx. a 31 de Mayo de 2022.

PROFESORES QUE INTEGRAN EL JURADO

	NOMBRE	FIRMA
PRESIDENTE	Dr. Eligio Pastor Rivero Martínez	
VOCAL	MC. Gilberto Atilano Amaya Ventura	
SECRETARIO	M.C. Graciela Martínez Cruz	
1er. SUPLENTE	Dr. Julio César Morales Mejía	
2do. SUPLENTE	Dra. Francisca Alicia Rodríguez Pérez	

NOTA: los sinodales suplentes están obligados a presentarse el día y hora del Examen Profesional (art. 127).

MCVB/cga*

Agradecimiento

Investigación realizada gracias al Fondo Sectorial Conacyt-SENER-Sustentabilidad Energética, proyecto 292862, titulado Desarrollo de tecnologías de almacenamiento de energía de bajo costo: Baterías de flujo y celdas de combustible alcalinas.

Dedicatoria

A mi madre, por tu esfuerzo y dedicación para que pudiera concluir con éxito mi carrera, por tu apoyo ilimitado e incondicional que siempre me has dado ya sea en momentos difíciles, momentos agradables y en todos los aspectos.

A mi padre, por las enseñanzas que me has dado, dándome las bases para llegar a donde he llegado, por haberme apoyado en todo momento para convertirme en la persona que soy ahora.

A mi familia, gracias por darme ánimos para concluir esta etapa de mi vida.

A mis profesores, que me brindaron su apoyo, conocimientos y experiencia docente en mi formación académica.

Al Dr. Eligio Pastor, es usted un gran profesor, le agradezco por todo el apoyo y paciencia en la elaboración de este trabajo, así como por su instrucción en las asignaturas de la carrera, a lo largo de mi educación universitaria, me identifiqué con su forma de llevar a cabo su buena enseñanza.

Índice de contenido

Resumen.....	1
Introducción.....	2
Objetivo general.....	4
Objetivos particulares.....	4
1 Conceptos generales de energías alternativas y baterías de flujo redox.....	5
1.1 Energías alternativas.....	5
1.2 Métodos de almacenamiento de energía.....	8
1.3 Historia de las baterías de flujo redox.....	11
1.4 Antecedentes de estudios CFD.....	11
1.5 Historia y descripción general de la dinámica de fluidos computacional.....	13
2 Características generales de una CFR.....	16
2.1 Descripción, estructura y funcionamiento.....	16
2.2 Variables de operación y efectos en el rendimiento.....	18
2.3 Descripción general de modelos matemáticos, ecuaciones y técnicas software.....	20
2.4 Software CFD aplicable a CFR.....	27
3 Metodología.....	29
3.1 Desarrollo del modelo geométrico.....	29
3.2 Modelado hidrodinámico de la celda.....	34
3.3 Diseño del plan de simulación.....	36
3.4 Condiciones físicas y a la frontera.....	38

4 Resultados	39
4.1 Estudio de mallado.....	39
4.2 Estudio hidrodinámico de la celda.....	40
4.2.1 Caída de presión y velocidad en los canales.....	41
4.2.2 Caída de presión y velocidad en el electrodo.....	46
4.3 Efecto del área en la celda.....	48
Conclusiones	53
Glosario	54
Bibliografía	55

Índice de figuras

Introducción

Figura 1. Consumo energético a finales del siglo XX y principios del siglo XXI.....2

Capítulo 1

Figura 2. Metas de energías limpias en la generación eléctrica en México.....5

Figura 3. Radiación solar promedio anual en la República Mexicana.....6

Figura 4. Desarrollo mundial de energía eólica 1895 – 2000.....6

Figura 5. Espectro de variables a considerar en la construcción de una RFB.....10

Capítulo 2

Figura 6. Celda electroquímica comercial Flex-Stak.....16

Figura 7. Batería de flujo comercial Flex-Stak.....17

Figura 8. Funcionamiento general de una CFR.....18

Capítulo 3

Figura 9. Partes de una celda de flujo redox marca TDM.....29

Figura 10. Características de uno de los electrodos con geometría interdigital de una celda de flujo redox.....29

Figura 11. Representación geométrica de los parámetros de construcción.....31

Figura 12. Canales de distribución de la celda separados por “ribs”.....32

Figura 13. Canales de entrada, distribución y salida de la celda.....33

Figura 14. Vista 3D del volumen ocupado por el fluido.....33

Figura 15. Dominios de la CFR.....37

Figura 16. Comparación entre el mallado extremadamente grueso y normal.....38

Capítulo 4

Figura 17. Caída de presión en función del mallado utilizado.....	40
Figura 18. Mallado tipo 3 generado en el electrodo y canales de distribución.....	40
Figura 19. Caída de presión en función del flujo volumétrico en celda de 2500 mm ²	41
Figura 20. Gráfico de volumen 3D de la caída de presión para un flujo de 25 cm ³ /min.....	42
Figura 21. Corte 3D entre dos puntos dentro de la celda de 2500 mm ²	42
Figura 22. Gráfico 1D de la presión en los canales, con una línea de corte 3D entre dos puntos para un flujo de 25 cm ³ /min.....	43
Figura 23. Velocidad en un plano de corte YZ y 15 planos para un flujo de 25 cm ³ /min.....	44
Figura 24. Velocidad en un plano de corte ZX y 5 planos para un flujo de 25 cm ³ /min.....	44
Figura 25. Velocidad en un plano de corte XY y 10 planos para un flujo de 25 cm ³ /min.....	45
Figura 26. Gráfico 1D de la velocidad en los canales con una línea de corte 3D entre dos puntos para un flujo de 25 cm ³ /min.....	46
Figura 27. Plano de corte XY en la coordenada z = 0.0041 m.....	46
Figura 28. Caída de presión en un plano de corte XY coordenada z = 0.0041 m en el electrodo para un flujo de 25 cm ³ /min.....	47
Figura 29. Velocidad en un plano de corte XY coordenada z = 0.0041 m en el electrodo para un flujo de 25 cm ³ /min.....	48
Figura 30. Comparación de los resultados de caída de presión en función del flujo másico en celdas de distintas áreas.....	49
Figura 31. Comparación de los resultados de caída de presión en función del flujo másico en celdas de distintas áreas y mayor número de canales de distribución.....	50
Figura 32. Comparación entre celdas de 1000 cm ² y diferente número de canales.....	51
Figura 33. Caída de presión en función del flujo másico en celdas de 1000 cm ²	52

Índice de tablas.

Capítulo 1

Tabla 1. Ventajas y desventajas de las energías limpias.....	7
--	---

Capítulo 3

Tabla 2. Procedimiento de ensamblado del modelo geométrico.....	30
---	----

Tabla 3. Parámetros de construcción de la celda original.....	31
---	----

Tabla 4. Descripción de las simulaciones realizadas.....	36
--	----

Tabla 5. Tipos de mallado y cantidad de elementos generados.....	36
--	----

Capítulo 4

Tabla 6. Resultados del estudio de mallado.....	39
---	----

Tabla 7. Coordenadas de los puntos de corte de la figura 19, 20 y 24.....	43
---	----

Tabla 8. Parámetros de las celdas escaladas.....	48
--	----

Tabla 9. Parámetros de las celdas escaladas y mayor número de canales.....	49
--	----

Tabla 10. Parámetros de las celdas con área de 1000 cm ²	51
---	----

Resumen

El presente trabajo de tesis aborda el problema del almacenamiento de energía de fuentes limpias. Estas fuentes de energía, particularmente, la solar y la eólica, son de naturaleza variable, así como sujetas a cambios estacionales, por lo que se requieren sistemas de almacenamiento para poder suministrar la energía con la calidad y estabilidad necesaria. Uno de los métodos más prometedores para almacenar energía en diferentes escalas es el de la batería de flujo redox. Estas baterías almacenan la energía por medio de reacciones electroquímicas de oxidación y reducción que se llevan a cabo en una celda electroquímica. Los productos de las reacciones se almacenan en tanques para ser utilizados posteriormente durante la recuperación de la energía de la batería. Sin embargo, aún se necesita desarrollar baterías más eficientes y económicas. Una de las herramientas que puede ayudar a analizar el comportamiento de las baterías de flujo redox y así poder mejorar su desempeño, es la dinámica de fluidos computacional (CFD por sus siglas en inglés).

Para describir la hidrodinámica en el interior de estas celdas, el presente trabajo de tesis se destina a una investigación teórica enfocada a la simulación de celdas de flujo redox, utilizando la dinámica de fluidos computacional. Se presenta la información bibliográfica recabada para establecer el funcionamiento de las baterías con campo de flujo interdigital. De acuerdo con la literatura, este tipo de campo de flujo ofrece la ventaja de una menor caída de presión en comparación con los diseños tipo serpentin o de campo de flujo abierto. En la tesis se revisan las bases de las que parte el estudio y los criterios de ingeniería más importantes a tomar en cuenta para el almacenamiento de energía.

Se revisan los fundamentos importantes y las características generales de una batería de campo de flujo interdigital, se analizan las variables de operación y el efecto que tienen estas en el rendimiento de la celda para obtener bajas caídas de presión, una alta rapidez de transferencia de masa y bajas pérdidas de potencial eléctrico.

Para la simulación se utiliza el modelo de flujo libre y poroso que es una combinación de las ecuaciones de Navier - Stokes y Brinkman. El primero se utiliza en los canales de distribución y el segundo para el flujo en los electrodos porosos. Los resultados muestran el comportamiento de velocidad y presión del fluido en las diferentes zonas de la celda y, lo más importante, muestran la forma como cambian estas variables al modificar los parámetros geométricos de la celda y el flujo volumétrico.

Introducción

Cuando se habla de obtención o producción de energía, inmediatamente pensamos en aquellas que se obtienen a partir de combustibles fósiles, como puede ser el petróleo o el gas natural, siendo estos capaces de generar gases de efecto invernadero y emisiones contaminantes. La Figura 1 muestra el crecimiento constante en el consumo mundial de energía y las principales fuentes energéticas. Como puede observarse, la mayor cantidad de energía se obtiene de fuentes fósiles, las cuáles son la principal causante de una de las problemáticas a nivel mundial más significativas de la última década debido al crecimiento del uso desmedido.

Hoy en día, las principales potencias mundiales han destinado gran parte de sus recursos a la creación y desarrollo de tecnología y alternativas sustentables. Las más importantes fuentes de energía amigables con el medio ambiente son las energías solar y eólica. Aunque estas, a pesar de ser efectivas no dejan de ser intermitentes, ya que dependen en demasía de las condiciones climáticas y por ende, no están disponibles en todo momento para todo el mundo.

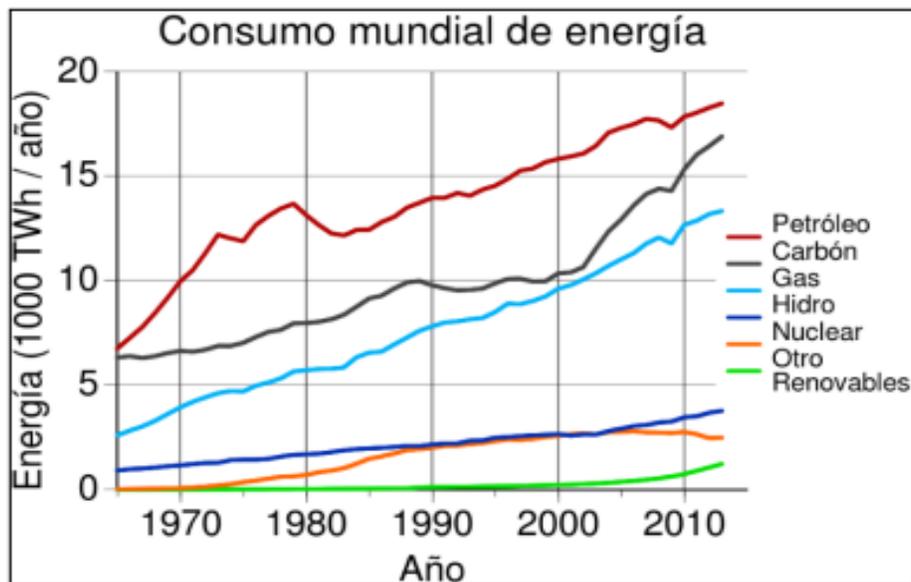


Figura 1. Consumo energético a finales del siglo XX y principio del siglo XXI [1].

Para aprovechar el potencial de estos sistemas alternativos, considerando su variabilidad, se requiere de sistemas de almacenamiento de energía con el fin de suministrar la energía de forma estable.

Se han desarrollado distintos métodos a nivel de investigación y aplicación industrial entre los que destacan:

Almacenamiento de energía hidrobombada (PHES)
Energía almacenada en aire comprimido (CAES)
Almacenamiento de energía térmica (TES)
Almacenamiento de energía de movimiento con rotores (FES)
Almacenamiento de energía en superconductores magnéticos (SMES)
Uso de capacitores eléctricos de doble capa (EDLC)
Almacenamiento de energía electroquímica (ECES)

Dentro de esta última rúbrica, se encuentra una de las soluciones más viables y prometedoras, mediante el uso de baterías de flujo de redox. En la actualidad, se comercializan baterías de flujo redox elaboradas con base en vanadio, ya que este elemento ha sido el más estudiado por décadas y presenta características apropiadas (potencial, solubilidad, estados de oxidación, etc), convirtiéndose en el sistema más desarrollado actualmente para su uso cotidiano.

El problema principal de la elaboración de las RFB utilizando vanadio, es que el costo es de 300 a 800 dólares el kWh [2]. Un costo demasiado elevado para su uso generalizado a gran escala. Es por ello que se deben buscar otras opciones para esta disyuntiva.

Se necesita desarrollar almacenadores de energía económicos y eficientes para hacer frente a la contaminación ambiental desmedida provocada por la explotación de combustibles fósiles. El desarrollo de estos almacenadores de energía involucra diferentes aspectos de las baterías; entre los más importantes de ellos están:

- a) El desarrollo de pares redox con características sobresalientes en cuanto a potencial eléctrico, solubilidad, bajo costo, baja toxicidad, bajo nivel de degradación durante repetidos ciclos de carga y descarga, entre otras características.
- b) Uso de materiales económicos con las propiedades necesarias.
- c) Diseño de ingeniería de la celda para alcanzar altas eficiencias.

En el presente trabajo nos enfocaremos en este último aspecto, particularmente en el comportamiento hidrodinámico de la celda. Evidentemente al hablar de tecnologías emergentes, los gastos que conllevan la compra o construcción de equipo, sumado a los generados por la experimentación serían muy altos. Es por ello, que nos apoyaremos de la dinámica de fluidos computacional, una herramienta que nos permite disminuir las pruebas experimentales al poder realizar simulaciones con diferentes geometrías y condiciones, antes de llegar a la parte experimental.

Objetivo general

- Encontrar una configuración de condiciones de operación adecuadas para el diseño de baterías de flujo redox, a través de la simulación del campo de flujo en una batería de flujo redox.

Objetivos particulares

- Entender el funcionamiento del proceso que se lleva a cabo en una batería de flujo redox.
- Promover el uso de energías alternativas y disminuir el uso de combustibles fósiles contaminantes.
- Mostrar el uso de la dinámica de fluidos computacional en la batería de flujo redox.

Capítulo 1

1. Conceptos generales de energías alternativas y baterías de flujo redox.

1.1. Energías alternativas.

No es un secreto para la humanidad la problemática ambiental a la que nos enfrentamos desde hace ya un buen tiempo ya que es notable el gran porcentaje de combustibles (gas, petróleo y carbón) que liberan gases contaminantes a la atmósfera durante la producción de energía eléctrica. Es por esto que a lo largo de los años se han desarrollado alternativas a la explotación exponencial de los combustibles fósiles para la obtención de energía. Sin embargo, estas alternativas menos contaminantes se han utilizado muy poco. La Figura 2 ilustra las metas que desean alcanzar según el plan de transición energética para la CDMX en la obtención de energía eléctrica a partir de energías limpias.

Las energías renovables, son las principales fuentes de energía limpia en el mundo, ya que se producen de forma continua y son inagotables a escala humana, esto es siempre y cuando se respeten los ciclos naturales de la tierra,

Año	Metas mínimas
2018	25%
2021	30%
2024	35%

Figura 2. Metas de energías limpias en la generación eléctrica en México [3].

La principal alternativa sustentable para satisfacer la demanda de electricidad ha sido el aprovechamiento de la energía solar, ya que el Sol es una fuente inagotable de energía (en la escala humana) ligada estrechamente a la vida como la conocemos. Además esta fuente de energía se encuentra disponible en una gran variedad de las regiones del mundo. En particular en nuestro país hay una excelente radiación solar en gran parte del territorio nacional como muestra la Figura 3.

El Sol es el responsable del ciclo del agua, de la fotosíntesis, etc., procesos que también son utilizados como fuentes de energía (energía hidroeléctrica, biomasa, energía eólica, etc.). Una de estas fuentes de energía, la eólica, ha mostrado un crecimiento significativo en los últimos años, como se observa en la Figura 4.

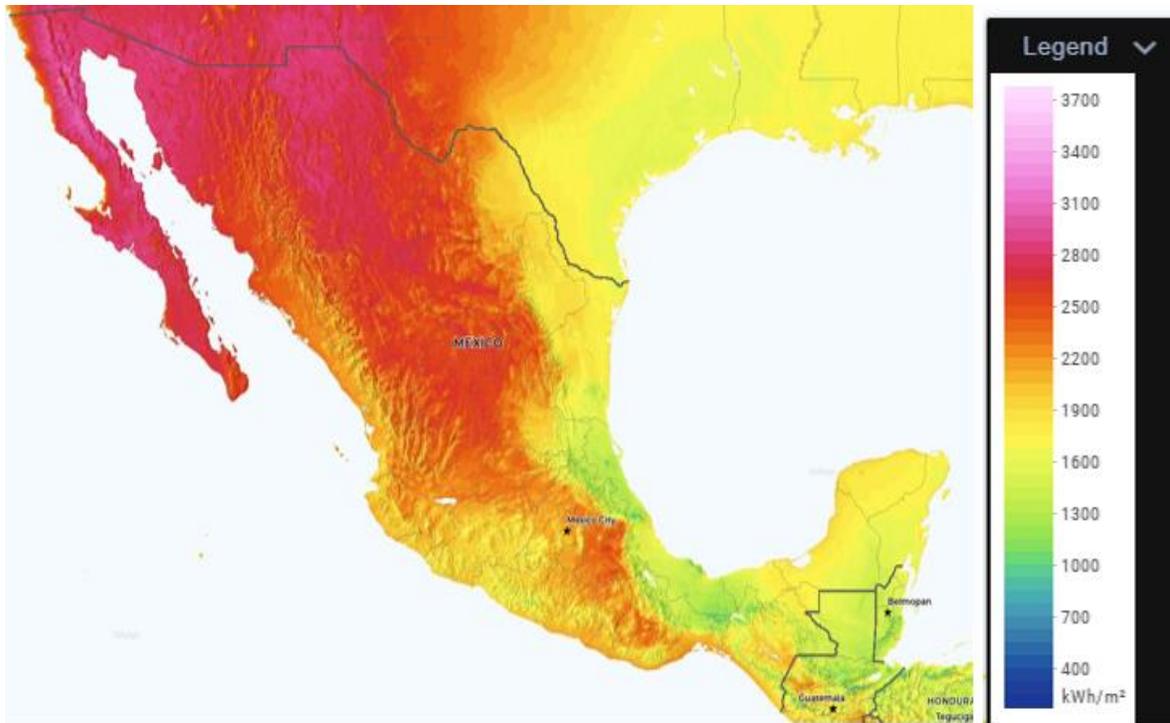


Figura 3. Radiación solar promedio anual en la República Mexicana [4].

En un inicio las técnicas para aprovechar la energía solar eran de forma pasiva, como usar paredes gruesas que evitan que el calor se disipe en temporadas de frío, o utilizar ventanales de vidrio que permitan el acceso de la luz, y atrapen el calor. A medida que pasaba el tiempo y avanzaba la tecnología, estas técnicas dejaron de ser tan rudimentarias, y se logró explotar este recurso de forma más eficiente, a través de su potencial térmico, transfiriendo calor de un cuerpo a otro. Y en otra medida, haciendo uso de paneles solares, se logró obtener energía fotovoltaica.

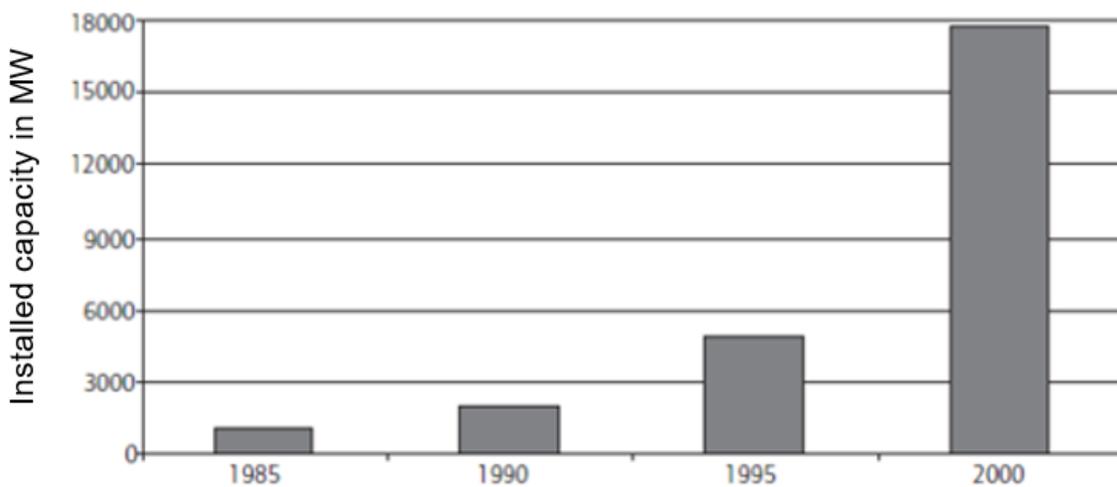


Figura 4. Desarrollo mundial de energía eólica 1895 – 2000 [5].

La energía eólica, tiene su campo de aplicación en los aerogeneradores, ya que estos extraen la fuerza de los vientos y la convierte en electricidad, es decir, en ningún momento altera el equilibrio térmico del planeta, ni disminuye la fuerza ni cantidad de los vientos por el uso.

El uso de la biomasa puede ser benéfico para la humanidad, siempre y cuando se respete la velocidad con la que el medio ambiente se renueva, y nunca se use más del que se puede regenerar, ya que si se usa en exceso puede traer consecuencias graves. Un ejemplo del uso inadecuado de este tipo de energía es utilizar la biomasa como leña, lo que provoca una degradación rápida de los ecosistemas naturales provocando problemas de erosión y desertización.

El buen uso de todos estos tipos de energías renovables, beneficiaría a toda la humanidad y en especial al medio ambiente, debido a que son recursos prácticamente inagotables que pueden ser usados de forma adecuada para un beneficio propio.

Tabla 1. Ventajas y desventajas de las energías limpias.	
Ventajas	Desventajas
No se emiten gases de efecto invernadero.	Inversión inicial alta.
“Inagotable”.	Fluctuaciones.
Segura.	Almacenamiento.
Generación cercana al punto de consumo.	Aprovechamiento limitado en ciertas partes del planeta.
Uso en sitios remotos.	

Como se puede apreciar en la Tabla 1, las desventajas de las energías renovables son el aspecto económico ya que el acceso a esta tecnología resulta regularmente más costoso en comparación con la tecnología a base de combustibles fósiles, lo cual limita usar estos recursos. Y, en caso de poder acceder a estas fuentes de energía, nos encontramos con la cuestión de que no están disponibles (en condiciones adecuadas) en todas las regiones del planeta, o su obtención es intermitente según el clima o la estación del año en donde nos encontremos. Esto último aplica especialmente al aprovechamiento de las energías solar y eólica por lo que se requiere de sistemas de almacenamiento de energía. Es por eso, que debemos buscar soluciones viables, económicas y de menor impacto ambiental a las que tenemos por el momento.

1.2 Métodos de almacenamiento de energía.

Una de las principales problemáticas para la implementación masiva de energías alternativas, en particular de energía solar y eólica, es que no existen métodos sencillos y económicos de almacenamiento de energía que permitan el uso de la energía en el momento en que se necesite. Es de vital importancia resolver este aspecto por la intermitencia y variabilidad a las que están sometidas estas fuentes de energía. Se han propuesto diversos métodos de almacenamiento de energía, los cuales presentan diferentes grados de desarrollo y su problemática particular. Estos sistemas de almacenamiento de energía deben asegurar una operación confiable y respuesta rápida a la demanda de energía, además de larga duración durante un gran número de ciclos de carga y descarga.

A continuación se explica en qué consisten los procesos de almacenamiento de energía más destacados en cuanto a su desempeño en aplicaciones en el sistema eléctrico:

- **Almacenamiento de energía hidrobombada (PHES)**

Consiste en bombear agua a un depósito de almacenamiento elevado. Este tipo de almacenamiento es adecuado para ofrecer servicios de alta potencia a largo plazo, es decir, para la gestión de energía, siendo capaz de asumir la carga en pocos segundos. Sin embargo, estas plantas deben ubicarse en terrenos montañosos apropiados y extensos ocasionando cambios en el medio ambiente, lo que limita su aplicabilidad.

- **Energía almacenada en aire comprimido (CAES)**

Se realiza en enormes cuevas subterráneas. Ofrece un servicio similar al almacenamiento de energía hidrobombada. Este sistema puede ayudar a almacenar mejor la energía proveniente de parques eólicos, maximizando la capacidad de almacenamiento a la red eléctrica a un costo de operación mínimo. De esta forma, el sistema CAES maximiza los ingresos productivos por la venta de electricidad, llegando a ser un sistema de electricidad comercialmente competitivo.

- **Almacenamiento de energía térmica (TES)**

Se utiliza en torres de energía solar para retrasar el envío de energía a un turboalternador, así como su conversión de energía térmica a eléctrica. Existen tres sistemas de almacenamiento térmico que se han probado en plantas piloto, llevándose a cabo diseños de sistemas comerciales, los cuales son: Sistema en medio sólido, sistemas de sales fundidas y el sistema por cambio de fase. Dichos sistemas son diferentes por su tamaño, por lo tanto, la evaluación de impacto ambiental se realiza por kg de material de almacenamiento y por kWh almacenado.

- **Almacenamiento de energía de movimiento con rotores (FES)**

Estos sistemas, son capaces de dar una respuesta rápida con respecto a los ciclos de carga y descarga de energía, debido a que estos ciclos se llevan a cabo en cortos periodos de tiempo. La eficiencia de estos sistemas de almacenamiento de energía es alta, mientras el tiempo de descarga sea corto; de otra forma la eficiencia disminuye por los efectos de fricción aun con el uso de cojinetes electromagnéticos.

- **Almacenamiento de energía en superconductores magnéticos (SMES)**

Los superconductores requieren un ambiente criogénico, es decir, un sistema de enfriamiento a muy bajas temperaturas. Se utilizan principalmente para producir campos magnéticos en equipos de resonancia magnética y para dispositivos utilizados a nivel laboratorio. Las SMES, son adecuadas para el almacenamiento de energía en campos magnéticos en servicios de la red eléctrica para realizar operaciones rápidas y ofrecer servicios de energía de gran calidad.

- **Uso de capacitores eléctricos de doble capa (EDLC)**

Los capacitores eléctricos de doble capa, son utilizados como almacenadores de energía auxiliares, permitiendo ayudar a otras fuentes de alimentación a hacer frente a los requerimientos de sobretensión o sobrecarga de energía. Generalmente esto se aplica en el sector automotriz en vehículos eléctricos / híbridos.

- **Almacenamiento de energía electroquímica (ECES)**

Este sistema de almacenamiento es la solución para ayudar a los generadores intermitentes de energía renovable. También puede ayudar a los generadores de energía a resolver problemas a corto, mediano y largo plazo, debido a su versatilidad y modularidad, permitiendo una amplia capacidad de carga, una facilidad de operación y una estructura estática.

Como se puede apreciar, estas opciones están enfocadas al uso industrial y muchas de ellas no resuelven la problemática para el uso doméstico o a menor escala, por lo que es necesario desarrollar tecnología capaz de satisfacer ambas necesidades. En el caso del almacenamiento de energía de fuentes limpias, una solución prometedora y viable es la implementación de baterías de flujo redox.

Las baterías de flujo redox (RFB) son dispositivos electroquímicos donde las soluciones que contienen los electrolitos de pares redox, se cargan en un reactor electroquímico (batería). Posteriormente los electrolitos cargados se almacenan en tanques separados.

La generación de electricidad durante la descarga de la batería puede realizarse haciendo que los electrolitos cargados, regresen a la batería donde se lleva a cabo el proceso de descarga es decir, hablamos de una reacción reversible.

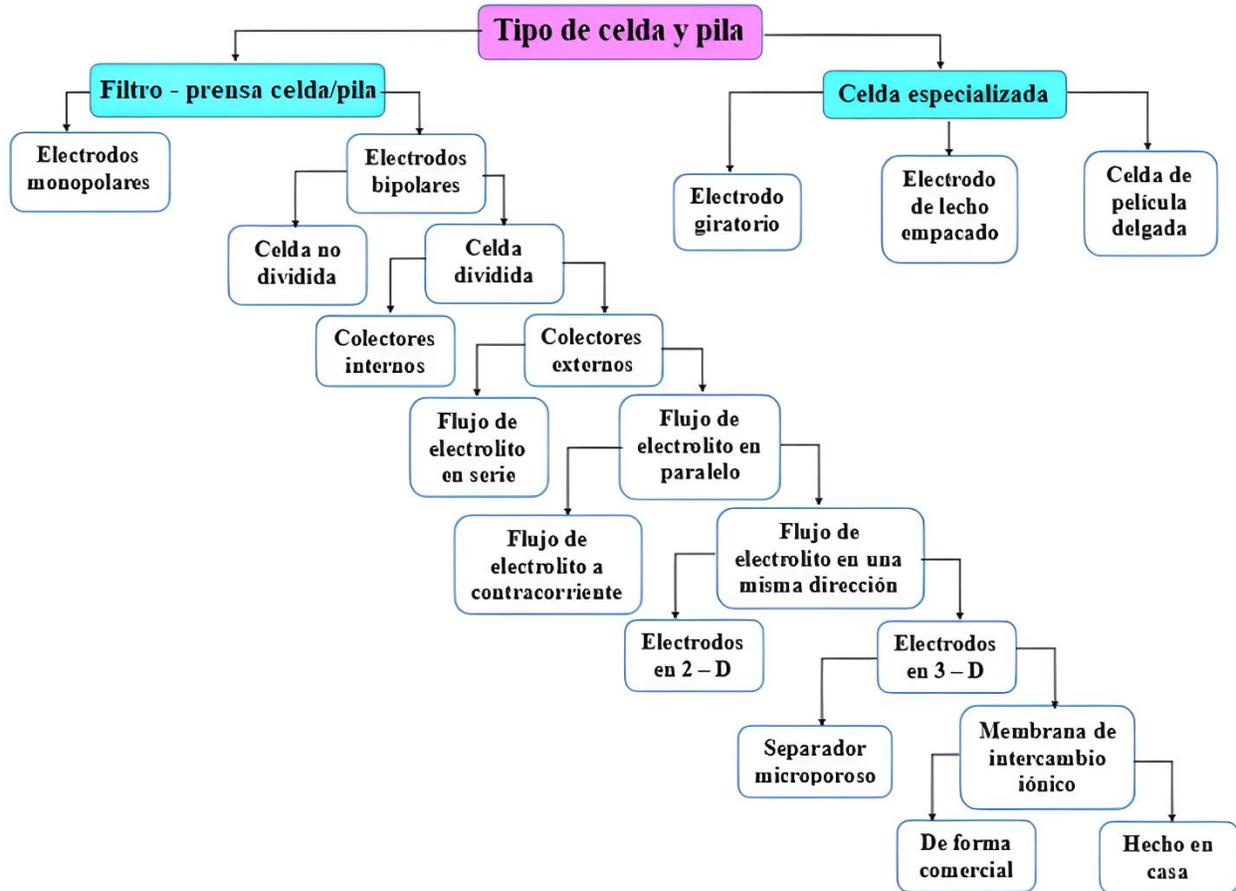


Figura 5. Espectro de variables a considerar en la construcción de una RFB [1].

En cuanto a la construcción de estos equipos, es necesario tener una amplia variedad de conocimientos en las áreas de electroquímica, química, ingeniería, ciencia de materiales, simulación y modelado computacional. La Figura 5 muestra los aspectos de ingeniería imprescindibles, es decir, las opciones a considerar respecto al diseño de una celda RFB.

Cada una de las decisiones que se toman son fundamentales para el funcionamiento de la celda, ya que cualquier mínimo cambio en el diseño impactará de forma significativa en el rendimiento, y por ende en los resultados deseados.

1.3 Historia de las baterías de flujo redox.

El concepto de una batería de flujo redox (RFB), empezó a definirse en el año de 1949 con una patente de W. Kangro, seguido de una publicación realizada en 1955 por A. M. Posner [1]. Se hicieron sugerencias acerca del principio de funcionamiento de las RFB, hasta que en el año de 1984 dicho principio fue dirigido hacia una batería de cloro – cromo, ya que el par $\text{Cl}^- / \text{Cr}^{3+}$, fue el primero con el que se realizaron los diseños de las primeras baterías de flujo con una eficiencia considerablemente alta. Sin embargo, el Cr^{6+} , es un elemento contaminante al medio ambiente, por lo que se hicieron investigaciones con otros elementos menos contaminantes y sobre todo de menor costo.

Para el año de 1966, se probaron por primera vez las RFB híbridas de Zn – aire, con un electrolito líquido. Los desarrollos modernos de las RFB, fueron motivados por científicos de Estados Unidos, sobre posibles fuentes de energía para vuelos espaciales; dichos desarrollos fueron llevados a cabo por la administración nacional aeronáutica y del espacio (NASA), en los años de 1970.

En el año de 1974 se llevó a cabo la publicación de la introducción de la batería Fe – Cr, desarrollado por L. H. Thaller [6]. Con el transcurso del tiempo, se han realizado investigaciones con respecto a otros pares redox, por ejemplo: $\text{Br}^- / \text{Br}^{3-}$ y $\text{V}^{4+} / \text{V}^{5+}$. La NASA ha sido uno de los grupos fundadores en la investigación de pares redox para las baterías de flujo redox.

Cualquier RFB de alto rendimiento, debe contener las siguientes características principales:

- Celda de alta potencia.
- Altos valores de corriente en la celda.
- Celda con alta eficiencia energética.
- Celda con largo ciclo de vida.
- Celda con sentido práctico.
- Celda con alta capacidad de almacenamiento de energía.
- Celdas con ciclos de vida estables de carga – descarga.

1.4 Antecedentes de estudios CFD.

Como se mencionaba anteriormente, las baterías de flujo redox se han posicionado como una de las soluciones más importantes a desarrollar para la solución de los problemas de generación variable de energía, tales como inestabilidad, variaciones de potencia, horarios de captación y demanda. Es por esto que en los últimos años se han presentado una gran cantidad de estudios para el desarrollo de esta tecnología.

Maurya, *et al.*, han publicado un estudio sobre el efecto de la geometría del campo de flujo sobre la densidad de corriente, la capacidad y el rendimiento de la batería de flujo redox de vanadio [7]. En este estudio, se investigaron las VRFB con configuración serpentina, interdigital, convencional y de espaciamiento cero (zero gap). Se estudió el comportamiento de polarización y rendimiento cíclico en los diferentes campos de flujo. Los autores utilizaron un método mejorado para registrar las curvas de polarización sin agotar el estado de carga (SOC por sus siglas en inglés) para comparar los rendimientos. Se evaluaron los efectos de los campos de flujo, el caudal, el SOC y las geometrías de las celdas sobre las curvas de polarización.

El modelado del campo de flujo en los canales y electrodos por medio de dinámica de fluidos computacional (CFD) se utiliza en este trabajo para examinar los efectos del transporte de masa en el rendimiento de la batería. De igual manera se estudia el efecto del campo de flujo de las diferentes geometrías sobre la caída de presión.

En otro estudio, Gundlapalli y Jayanti llevaron a cabo la evaluación del rendimiento de diferentes variantes de campos de flujo interdigital en baterías de flujo [8]. Los autores mencionan que el diseño de un campo de flujo óptimo no es simple y depende de la interacción compleja entre la geometría del campo de flujo, de las condiciones de operación y de las propiedades del electrolito y el electrodo; que en conjunto afectan el transporte convectivo en la zona de reacción de una batería de flujo. Como la densidad de potencia se rige principalmente por el transporte de especies activas en el electrodo, es fundamental diseñar un campo de flujo que mejore la uniformidad de la distribución de los reactivos para reducir la polarización de concentración del transporte de masa.

Aparicio - Mauricio *et al.*, investigaron la distribución de tiempos de residencia mediante modelado CFD y su validación experimental en una batería de flujo redox utilizando flujo libre y flujo en un medio poroso [9]. Estos autores reportan que la eficiencia de un sistema RFB depende en gran medida del flujo de electrolitos, transporte de masa, conversión de reactivos y distribución de potencial de electrodos dentro de la batería. Para mejorar la eficiencia, se requiere una distribución uniforme de electrolitos dentro del área efectiva del electrodo, mientras que se deben evitar caudales excesivamente altos que dan como resultado altas pérdidas de bombeo y una baja eficiencia de la batería de flujo.

Por lo tanto, un campo de flujo bien diseñado minimizará la caída de presión requerida para hacer circular los electrolitos durante el proceso de carga y descarga, de modo que se pueda lograr una distribución homogénea de los reactivos a través del área efectiva de la batería. De esta forma, los reactivos se transportan por convección a la zona de reacción en la interfaz membrana / electrodo.

El desempeño hidrodinámico como una función del diseño del campo de flujo se ha explorado ampliamente y varios de esos estudios también son relevantes para las baterías de flujo. En particular, se ha demostrado que el uso de campos de flujo en serpentín o interdigitales, en baterías de flujo redox, puede producir mejoras en el rendimiento en comparación con los campos de flujo paralelo.

1.5 Historia y descripción general de la dinámica de fluidos computacional (CFD).

Dudley Brian Spalding (1923 - 2016), profesor de transferencia de calor y jefe de la unión de dinámica de fluidos computacionales en el Imperial College London. Fue uno de los pioneros del CFD, implementando sus aplicaciones a problemas de interés para los ingenieros. El CFD es una combinación de física, métodos numéricos e informática. La mayoría de las herramientas de software de CFD del día de hoy debe sus orígenes al trabajo hecho por el grupo de Spalding entre mediados de los años 60 y mediados de los 70.

Junto con su estudiante Suhas Patankar, desarrolló el algoritmo SIMPLE [10], un procedimiento numérico para la solución de las ecuaciones de Navier - Stokes. Patankar, es el autor de un libro de CFD titulado "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow". Este libro ha sido considerado desde entonces como una de las contribuciones más innovadoras para la dinámica de fluidos computacional, debido al énfasis en física y la perspectiva profunda hacia los fenómenos de la dinámica de fluidos y la transferencia de calor.

La dinámica de fluidos computacional o CFD es un análisis de sistemas que estudian el flujo de un fluido, transferencia de calor y fenómenos asociados como reacciones químicas, por medio de simulaciones. Esta técnica es muy poderosa y abarca un amplio rango de aplicaciones en áreas industriales y no industriales. Algunos ejemplos son:

- Simular difusión y convección de sustancias fluidas en distintos ambientes.
- Analizar la aerodinámica y aerotermodinámica de vehículos.
- Evaluar la refrigeración de equipamientos, como reactores nucleares, motores etc.
- Hacer estudios de caracterización de polución ambiental, dispersión de gases, análisis y simulación de eliminación de contaminantes en corrientes hídricas.
- Simular hidrodinámica y hemodinámica.
- Probar y desarrollar proyectos de sistemas propulsores y de generación de energía.

Cada vez más la CFD se convierte en un componente vital en el diseño de productos y procesos de la industria.

La disponibilidad de computadoras de alto rendimiento a un precio asequible y la introducción de interfaces fáciles de usar por el usuario han causado recientemente un gran interés, y la CFD ha entrado desde los años 90 a la comunidad industrial más grande.

A mediados de los años 80, el interés de la CFD comienza a centrarse en la resolución de las ecuaciones de Navier Stokes para flujos viscosos. Junto a este interés aparecen modelos numéricos para la resolución de flujos turbulentos como el “Direct Numerical Simulation” (DNS) y el “Large Eddy Simulation” (LES). El objetivo de un código de la CFD es la resolución de las ecuaciones de Navier - Stokes para un flujo con características determinadas y para una geometría en concreto.

Por tanto, el primer paso que se da en la resolución de las ecuaciones es la aplicación del llamado método de elementos finitos (MEF). El método propone que un número infinito de variables desconocidas, sean sustituidas por un número limitado de elementos de comportamiento bien definido.

El MEF es un método de aproximación de problemas continuos de tal forma que:

- La geometría continua se divide en un número finito de elementos, cuyo comportamiento se especifica mediante un número finito de parámetros asociados a ciertos puntos característicos denominados nodos.
- Las incógnitas del problema dejan de ser funciones matemáticas y pasan a ser el valor de estas funciones en los nodos.

Seleccionados los nodos, se unen mediante líneas dando lugar a elementos que pueden tener forma de triángulos y cuadriláteros en el caso de dominios bidimensionales, y tetraedros, prismas y pirámides en el caso de dominios tridimensionales, proceso que se denomina generación de mallado.

El MEF, por lo tanto, se basa en transformar un cuerpo de naturaleza continua en un modelo discreto aproximado. De esta forma se consigue pasar de un sistema continuo con infinitos grados de libertad, que es regido por una ecuación diferencial o un sistema de ecuaciones diferenciales, a otro con un número finito de grados libertad cuyo comportamiento se modela por un sistema de ecuaciones, lineales o no, proceso denominado discretización espacial.

La precisión depende de la cantidad de nodos y elementos, del tamaño y de los tipos de elementos de la malla. Por lo tanto, cuanto menor sea el tamaño y mayor el número de elementos en una malla, más precisos serán los resultados de las análisis.

COMSOL Multiphysics® 5.3 utiliza el método Galerkin para realizar la discretización espacial de la geometría en cuestión, mientras que para resolver el sistema de ecuaciones obtenido por el MEF existen opciones de métodos numéricos iterativos tales como:

- Método residual mínimo generalizado (GMRES)
- Método residual mínimo generalizado flexible (FGMRES)
- Método del gradiente biconjugado estabilizado (BiCGStab)
- Método del gradiente conjugado (CG)

Capítulo 2

2. Características generales de una CFR.

2.1 Descripción, estructura y funcionamiento.

Uno de los conceptos más importantes en el área de la electroquímica, es el concepto de celdas electroquímicas. Una celda electroquímica es un dispositivo capaz de generar energía eléctrica por medio de reacciones químicas. A su vez este dispositivo puede utilizar la energía eléctrica para llevar a cabo las reacciones químicas.

La celda, está constituida de dos semiceldas. Cada celda consta de un electrodo y un electrolito. Las semiceldas pueden usar el mismo electrolito o uno diferente. Comúnmente las baterías de flujo pueden contener una o más celdas electroquímicas.

Existen celdas comerciales con características determinadas que permiten desmontar y montar el equipo para adaptarla a las necesidades que tenga el experimento. En este caso se ocupó de referencia una pequeña celda de combustible de laboratorio obtenida de una página en internet dedicada a la distribución de estos equipos [11]. Las Figuras 6 y 7 son ejemplo de los productos que tienen disponibles.



Figura 6. Celda electroquímica comercial Flex-Stak [11].

El funcionamiento de la celda consiste en hacer circular por el sistema soluciones de electrolitos de pares redox, las cuales fluyen desde recipientes de almacenamiento hacia los canales de distribución pasando por sus respectivos canales de entrada hasta que el sistema se mantenga estable. Un ejemplo de esto se muestra en el esquema de la Figura 8.



Figura 7. Batería de flujo comercial Flex-Stak [11].

El funcionamiento de la celda consiste en hacer circular por el sistema soluciones de electrolitos de pares redox, las cuales fluyen desde recipientes de almacenamiento hacia los canales de distribución pasando por sus respectivos canales de entrada hasta que el sistema se mantenga estable. Un ejemplo de esto se muestra en el esquema de la Figura 8.

En el proceso de carga de la batería, en la semicelda azul ocurre la reacción de reducción, es decir, la ganancia de electrones aumentando la carga negativa. En la semicelda amarilla ocurre la oxidación, es decir, la pérdida de electrones de un grupo de átomos, cuyo fin es aumentar las cargas positivas.

Durante la carga, la electricidad se utiliza para impulsar las reacciones redox no espontáneas de las especies disueltas, almacenando de manera efectiva y/o eficaz la energía en los electrolitos. Durante la descarga, las reacciones ocurren de manera espontánea, es decir en sentido contrario a la carga, dando como resultado la liberación de la energía eléctrica.

Durante la carga, la electricidad se utiliza para impulsar las reacciones redox no espontáneas de las especies disueltas, almacenando de manera efectiva y/o eficaz la energía en los electrolitos. Durante la descarga, las reacciones ocurren de manera espontánea, es decir en sentido contrario a la carga, dando como resultado la liberación de la energía eléctrica.

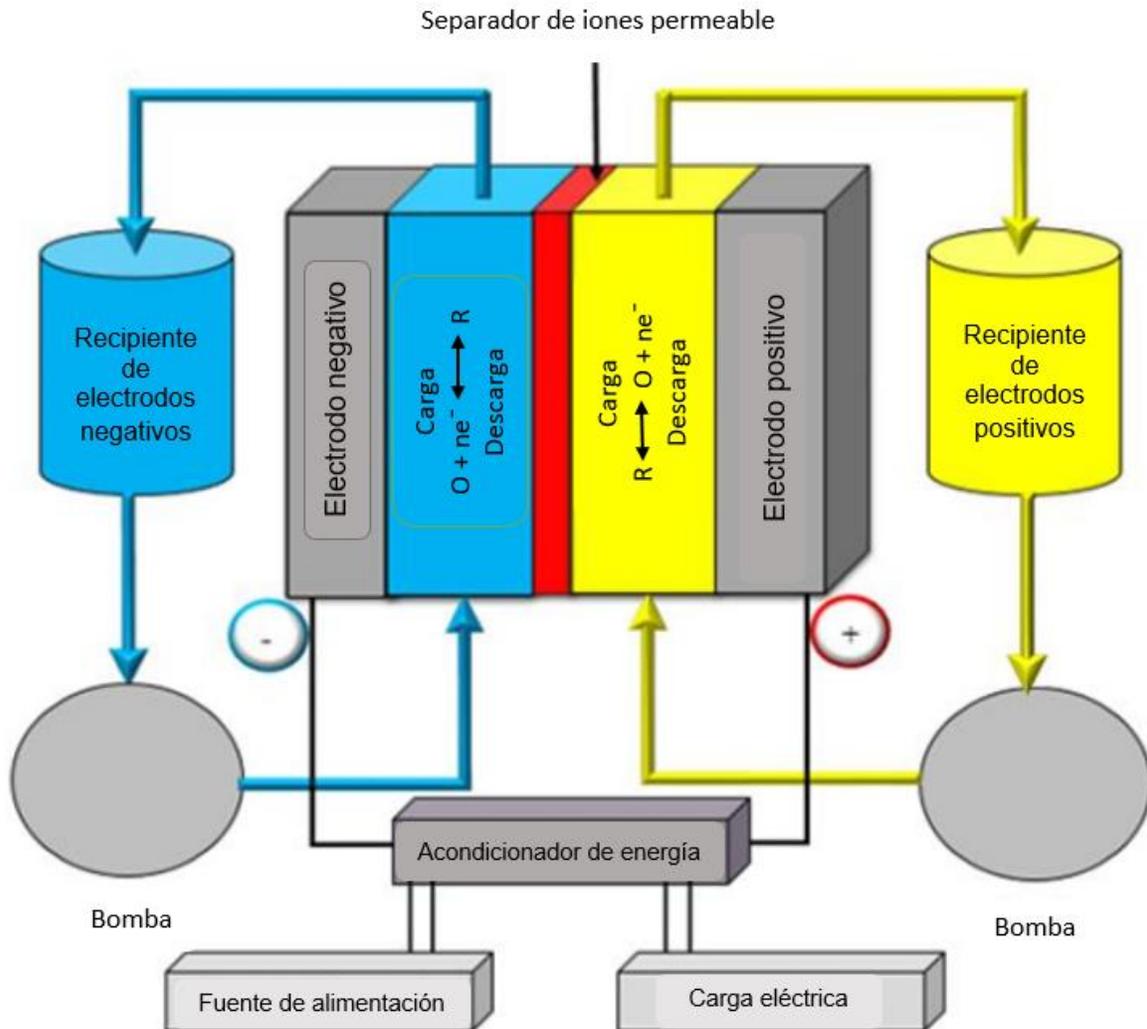


Figura 8. Funcionamiento general de una CFR [1].

2.2 Variables de operación y efectos en el rendimiento.

Existe una amplia gama de variables a considerar para sacarle el mayor rendimiento a una celda CFR, las más importantes a tomar en cuenta si se quiere diseñar una celda de alto rendimiento son:

Temperatura: Las CFR suelen trabajar en rangos de temperatura bajos entre los 20 y 40 °C, es importante mantener la temperatura dentro de estos niveles, ya que si se opera fuera de los límites habría cambios importantes en las propiedades físicas de las soluciones como la densidad, viscosidad, conductividad, etc.

Flujo volumétrico: Este parámetro es de vital importancia para el diseño de una CFR, ya que de este dependerá principalmente el tipo de flujo (laminar, transicional o turbulento), así como la configuración geométrica del campo de flujo, ya que se debe garantizar que el flujo sea disperso y uniforme para lograr que el suministro de reactivo y la tasa de transferencia de masa sean lo suficientemente altos para mantener una corriente uniforme y un potencial disperso en el electrodo, de lo contrario aparecerán zonas de estancamiento que reducen el grado de conversión y por lo tanto la eficiencia de la energía generando altas densidades de corriente localizadas.

Densidad de corriente: Optimizar la densidad de corriente es equivalente a optimizar el tamaño de la celda [12], para esto se ocupan expresiones que a través de un balance de masa en la zona de reacción involucran el potencial de la celda y la energía liberada durante la descarga y de esta forma, eventualmente, optimizar el espesor y la porosidad del electrodo.

Caída de presión y potencia de bombeo: Una CFR requiere de una caída de presión suficiente para mantener fluyendo el electrolito y lograr una buena tasa de transferencia de masa, suministro de reactivo adecuado y eliminación del producto. La operación de bombeo tiene un costo energético que reduce la eficiencia de las CFR, la potencia requerida para el bombeo es el producto del flujo volumétrico y la caída de presión. Las demandas de bombeo en una celda, aumentan debido a la velocidad de flujo del electrolito, un área de sección transversal baja, canales de flujo largos, uso de electrolitos de viscosidad alta, electrodos porosos o turbulencias en el canal de flujo.

Distribución de tiempos de residencia: Analizar la distribución de tiempos de residencia (DTR) es importante para determinar si un reactor tiene un comportamiento ideal en el patrón de flujo (CSTR o flujo pistón) o si hay desviaciones del comportamiento ideal (zonas estancadas o muertas, canalización, recirculación, "by-pass" y mezcla inversa). Una CFR debe manejar tiempos de residencia bajos, pero suficientes para garantizar una buena transferencia de masa.

Campo de flujo: Es importante elegir un campo de flujo que se ajuste a las características y necesidades en una CFR para su diseño, esta elección es vital ya que tiene efectos en la caída de presión, rapidez de transferencia de masa, pérdidas de potencial eléctrico, distribución de tiempos de residencia y geometría de la celda. Existen reportes [9] sobre que las caídas de presión en campos de flujo en serpentín incrementan drásticamente con el flujo volumétrico comparado con los reportes de caída de presión en campos de flujo interdigitales.

Geometría de la celda: Cambios que pueden parecer insignificantes en las dimensiones de la celda, juegan un papel importante en el diseño de una CFR, los cambios en el área de la celda significan un aumento o disminución en la caída de presión. You *et al.*, [13] concluyen en su estudio que la selección óptima del tamaño y la cantidad de los canales, es una etapa crucial en el diseño de campos de flujo para mejorar la uniformidad de la distribución del electrolito para lograr una buena densidad de corriente y tiempos de residencia eficientes. MacDonald y Darling [14] realizando simulaciones de campo de flujo en SFF e IFF sobre un área de celda de 100 cm² encontraron que este último mostró en general menor caída de presión que el primero.

2.3 Descripción general de modelos matemáticos, ecuaciones y técnicas.

Modelos matemáticos que se pueden aplicar a CFR

Al hablar de problemáticas que involucran el movimiento de fluidos es evidente que se tiene que trabajar con la ecuación de Navier - Stokes, la cual se puede modificar o ajustar a distintos modelos matemáticos que dependen principalmente del medio en el que transitan, la velocidad del fluido, la fase, etc.

Algunos de estos modelos son:

Flujo monofásico: Es el estudio clásico de la dinámica de fluidos, se enfoca en el flujo en una sola fase homogénea, como puede ser un líquido o un gas, ya sea en régimen laminar, turbulento o transicional.

Flujo polifásico: Es el estudio de flujo en más de una fase de forma simultánea, cada fase representa una fracción de volumen o masa y cada una de estas tiene propiedades físicas, velocidad y temperatura distintas.

Flujo de película delgada: El interés de este estudio es analizar problemáticas cuando el espesor del fluido es pequeño en comparación con su longitud, es decir, en películas delgadas de fluido. El modelo ideal para estudiar las películas delgadas es cuando descienden por un plano inclinado de tal manera que sea considerado el efecto de la gravedad en el movimiento del flujo.

Flujo en medio poroso: Este modelo es aplicable cuando el fluido deba viajar a través de alguna superficie que impida su libre flujo. Este estudio es de vital importancia en el entendimiento y desarrollo de las CFR debido a la necesidad de utilizar electrodos porosos, asimismo a la presencia de separadores los cuales son componentes cruciales en estos dispositivos, ya que proveen una barrera física entre los electrolitos al tiempo que permite el transporte de los iones portadores de carga y, además, previene el contacto de los electrodos en arquitecturas de espacio

cero [15]. Las membranas de intercambio iónico son las más utilizadas en estas baterías, aunque su principal desventaja es que suelen representar hasta el 40% de la inversión, y la alternativa son membranas micro o nano porosas que reducen el costo a expensas de un rendimiento inferior.

De estos modelos derivan bastantes opciones a considerar para una CFR pero dependerá de los objetivos planteados, el tipo de celda, el electrolito, etc.

Potencial de la celda

Cada celda tiene un potencial estándar característico o diferencia de potencial reportado en la literatura. El potencial de una celda unitaria en equilibrio, viene dado por la diferencia entre el potencial estándar de la reacción catódica y aniónica, como se muestra en la siguiente expresión matemática [15]:

$$E_{cell}^e = E_c^e + E_a^e \quad (1)$$

En la que:

E_{cell}^e : Potencial de celda en estado de equilibrio.

E_c^e : Potencial de reacción catódica en estado de equilibrio.

E_a^e : Potencial de reacción anódica en estado de equilibrio.

Este concepto se determina a partir de la termodinámica de la reacción, relacionando este concepto con el cambio de energía libre de Gibbs (ΔG_{cell}) o la máxima energía termodinámica disponible en una celda. Los potenciales E_c^e y E_a^e en un sistema ideal reversible, se pueden obtener por medio de la ecuación de Nernst en términos de concentración de cada especie.

La ecuación de Nernst es [15]:

$$E_e = E_e^\circ + \frac{2.3RT}{zF} \log \frac{[OX]}{[RED]} \quad (2)$$

Donde:

E_e : Potencial en estado de equilibrio de la reacción catódica o anódica.

E_e° : Potencial estándar del par redox en estado de equilibrio.

R : Constante general de los gases. [=] 8.314 J/kmol.

T : Temperatura absoluta.

F : Constante de Faraday [=] 96486 C/mol.

z : Número de electrones intercambiados.

$[OX]$: Concentración del agente oxidante.

$[RED]$: Concentración del agente reductor.

Aunque en la realidad, el potencial de la celda se sale de las condiciones de equilibrio ya que se involucran otras variables como pérdidas potenciales en las que se incluyen el sobrepotencial en cada electrodo y las pérdidas óhmicas presentes en los electrolitos, membranas y materiales de los electrodos. De esta forma la ecuación representativa para cualquier celda se escribe de la siguiente manera [15]:

$$E_{cell} = E_{cell}^e - \sum |\eta| - \sum |I|R \quad (3)$$

$\sum |\eta|$: Sobrepotencial total en la celda.

$\sum |I|R$: Pérdidas óhmicas totales en la celda.

Transferencia de masa

Una forma práctica de llevar a cabo un análisis aproximado a la realidad con respecto al transporte de masa de las especies activas es por medio de las correlaciones empíricas de números adimensionales que surgen a partir del análisis dimensional dentro de este sistema. Estas correlaciones son muy útiles en el desarrollo de las RFB a escala industrial, llevándose a cabo un estudio comparativo de diseño de celdas o de materiales para los electrodos ya sea en 2 o en 3 dimensiones.

La correlación de transferencia de masa en electrodos porosos de 3 dimensiones, está dada por el número de Sherwood [1]:

$$Sh = aRe^b Sc^c \quad (4)$$

Donde:

El coeficiente a , y los exponentes b y c son constantes que se determinan experimentalmente.

Número de Sherwood (Sh): Número adimensional que relaciona el fenómeno de transferencia de masa por convección y difusión.

$$Sh = \frac{k_m * d_e}{D_{AB}} \quad (5)$$

En el que:

k_m : Coeficiente de transferencia de masa.

d_e : Diámetro equivalente (hidráulico).

$$d_e = \frac{2A_x}{B + S} \quad (6)$$

B: Amplitud del canal rectangular.

S: Ancho del canal rectangular.

D_{AB} : Coeficiente de difusión para electrolitos.

El coeficiente de difusión para electrolitos fuertes se obtiene con la ecuación de Nernst – Haskell [16]:

$$D_{AB} = \frac{(|z_-|)(|z^+|)}{\left(\frac{|z_-|}{D_+}\right) + \left(\frac{|z^+|}{D_-}\right)} \quad (7)$$

$|z_{\pm}|$: Magnitud de carga iónica.

D_{\pm} : Difusividad de las especies aniónicas y catiónicas [16]:

$$D_{\pm} = \frac{8.9304 \times 10^{-13} (T) (\lambda_{\pm})}{|z_{\pm}|} \quad (8)$$

T: Temperatura.

λ_{\pm} : Conductancia a dilución infinita.

Número de Reynolds (Re): Número adimensional que describe el fenómeno de flujo del fluido.

$$Re = \frac{\rho v d_e}{\mu} \quad (9)$$

ρ : Densidad del fluido.

μ : Viscosidad dinámica del electrolito.

v: Velocidad promedio del electrolito, la cual se obtiene mediante la siguiente ecuación: (10)

$$v = \frac{Q_v}{\varepsilon_p * A_x}$$

Q_v : Flujo volumétrico.

ε_p : Porosidad del electrodo.

A_x : Área de sección transversal en el canal rectangular.

Número de Schmidt (Sc): Número adimensional que relaciona las propiedades de transporte (momentum a masa) del electrolito.

$$Sc = \frac{\nu}{D_{AB}} \quad (11)$$

ν : Viscosidad cinemática del electrolito.

D_{AB} : Coeficiente de difusión de las especies activas.

Distribución de tiempos de residencia (DTR)

Los modelos utilizados para determinar la DTR en CFR son el Modelo de dispersión axial (MDA) y el Modelo de dispersión con intercambio entre zonas dinámicas y estancadas (MID).

Los coeficientes y grado de dispersión dentro de la CFR se determinan obteniendo experimentalmente los valores de DTR, los cuales se obtienen haciendo circular una solución trazadora que es rastreada espectrofotométricamente (o con otros métodos) con la finalidad de detectar su concentración a la salida.

Subsecuentemente los datos obtenidos se ajustan a los modelos antes mencionados, y de esta forma pueden ser utilizados para predecir el comportamiento de las curvas experimentales de DTR haciendo uso de la dinámica de fluidos computacional (CFD). El sistema se representa mediante un modelo de flujo pistón teniendo en cuenta procesos de dispersión.

Modelo de dispersión axial (MDA)

La siguiente ecuación diferencial del MDA representa el balance de materia del trazador [15]:

$$\frac{\delta c}{\delta \theta} = \frac{1}{Pe} \frac{\delta^2 c}{\delta z^2} - \frac{\delta c}{\delta z} \quad (12)$$

Considerando un sistema de recipiente cerrado – cerrado se asumen las siguientes condiciones límite:

$$z = 0, c = 1 + \frac{1}{Pe} \frac{\delta c(0^+, \theta)}{\delta z}; z = 1, \frac{\delta c(1^-, \theta)}{\delta z} = 0 \quad (13)$$

La condición inicial antes de la presencia del trazador en la CFR es:

$$\theta = 0; c(z, \theta) = 0 \quad (14)$$

Las variables adimensionales de las expresiones de arriba son:

c : Concentración del trazador adimensional.

$$c = \frac{C}{C_0} \quad (15)$$

C : Concentración del trazador a cualquier tiempo.

C_0 : Concentración inicial del trazador.

Pe : Número de Péclet.

$$Pe = \frac{uL_z}{D_{ax}} \quad (16)$$

u : Velocidad superficial.

L_z : Longitud del reactor.

D_{ax} : Coeficiente de Distribución axial.

θ : Tiempo adimensional.

$$\theta = \frac{ut}{L_z} \quad (17)$$

t : Tiempo.

u : Velocidad superficial.

L_z : Longitud del reactor.

z : Longitud axial adimensional.

$$z = \frac{Z}{L_z} \quad (18)$$

Z : Posición en la dirección axial.

L_z : Longitud del reactor.

Modelo de dispersión con intercambio entre zonas dinámicas y estancadas (MID)

El Modelo de dispersión con intercambio entre zonas dinámicas y estancadas (MID) considera dos tipos de zonas de transporte de masa: (a) Una zona dinámica de fluido de flujo pistón con dispersión axial y (b) Una zona de estancamiento que exhibe el intercambio de trazador con la zona dinámica a bajas velocidades.

La concentración del trazador dentro de la zona dinámica está dada por la siguiente ecuación diferencial adimensional [15]:

$$\varphi \frac{\delta c_d}{\delta \theta} = \frac{1}{Pe_d} \frac{\delta^2 c_d}{\delta z^2} - \frac{\delta c_d}{\delta z} - N(c_d - c_s) \quad (19)$$

La concentración del trazador dentro de la zona de estancamiento está dada por la siguiente ecuación diferencial adimensional:

$$\frac{\delta c_s}{\delta \theta} = \frac{N}{1 - \varphi} (c_d - c_s) \quad (20)$$

Considerando un sistema de recipiente cerrado - cerrado, asumiendo las siguientes condiciones límite:

$$z = 0, c_d = 1 + \frac{1}{Pe_d} \frac{\delta c_d(0^+, \theta)}{\delta z}; z = 1, \frac{\delta c_d(1^-, \theta)}{\delta z} = 0 \theta = 0, c_d(z, \theta) = c_s(z, \theta) = 0 \quad (21)$$

Las variables adimensionales en las expresiones de arriba son:

c_d : Concentración del trazador en la zona dinámica adimensional.

$$c_d = \frac{C_d}{C_0} \quad (22)$$

C_d : Concentración del trazador en la zona dinámica a cualquier tiempo.

C_0 : Concentración inicial del trazador en la zona dinámica.

c_s : Concentración del trazador en la zona de estancamiento adimensional.

$$c_s = \frac{C_s}{C_0} \quad (23)$$

C_s : Concentración del trazador en la zona de estancamiento a cualquier tiempo.

C_0 : Concentración inicial del trazador en la zona de estancamiento.

z : Longitud axial adimensional.

$$z = \frac{Z}{L_z} \quad (24)$$

Z : Posición en la dirección axial.

L_z : Longitud del reactor.

θ : Tiempo adimensional.

$$\theta = \frac{u_{d,ef} t}{L_z} \quad (25)$$

t : Tiempo.

$u_{d,ef}$: Velocidad superficial efectiva en la zona dinámica.

Pe_d : Número de Péclet en la zona dinámica.

$$Pe_d = \frac{u_{d,ef} L_z}{D_{ax}} \quad (26)$$

L_z : Longitud del reactor.

D_{ax} : Coeficiente de Distribución axial.

N : Número de unidades de transferencia de masa.

$$N = \frac{k_{a,ef} L_z}{u_{d,ef}} \quad (27)$$

$k_{a,ef}$: Coeficiente volumétrico de transferencia de masa efectivo.

φ : Proporción de retención.

$$\varphi = \frac{h_d}{h_d + h_s} \quad (28)$$

h_d : Retención en la zona dinámica.

h_s : Retención en la zona de estancamiento.

2.4 Software CFD aplicable a CFR.

La dinámica de fluidos computacional (CFD) es una parte de la mecánica de fluidos que además permite a los ingenieros visualizar, analizar y probar los diseños de sus productos utilizando estructuras de datos y cálculos numéricos para resolver problemas de flujo de fluidos, la transferencia de calor, la turbulencia, los materiales no newtonianos, etc.

La tecnología ha facilitado que las organizaciones y los ingenieros calculen virtualmente la eficiencia de sus diseños en cualquier momento y en cualquier condición, ahorrando tiempo, esfuerzo y dinero.

Esta herramienta garantiza que se utilicen los mejores conceptos de mecánica de fluidos desde las primeras etapas del diseño del producto para permitir que los componentes funcionen de manera eficiente en diversas condiciones. El software CFD utiliza métodos avanzados para transformar leyes físicas de ecuaciones diferenciales parciales en ecuaciones algebraicas y resolverlas de manera eficiente.

En general, el análisis de la CFD implica tres fases principales:

1. El software transforma el problema en un modelo de computadora discreto e ideal. El usuario hace algunas suposiciones basadas en las propiedades físicas del fluido, el tipo de estudio (estacionario, transitorio, etc.). Se crea una malla y se fijan condiciones de inicio y a la frontera en las superficies que interactúan.
2. El análisis CFD utiliza potentes solucionadores que realizan cálculos reales sobre los problemas o ecuaciones de flujo de fluidos y brinda soluciones precisas y rápidas en comparación a lo que tardaría una persona.
3. Los usuarios visualizan y analizan los resultados en la fase final para concluir en forma de tablas, gráficos, imágenes en movimiento, etc.

Algunos de los paquetes de software disponibles en el mercado son:

1. COMSOL Multiphysics.
2. Autodesk CFD.
3. SimScale.
4. Ansys.
5. OpenFOAM.
6. CFD Module.
7. Flowsquare.
8. Paraview.
9. Altair.
10. SOLIDWORKS.

Capítulo 3

3. Metodología.

3.1 Desarrollo de modelo geométrico.

En la Figura 9 se observa una CFR desmontada, en la que se puede apreciar que está separada en dos, cada una de estas partes representa el cátodo y el ánodo del sistema, cada uno de estos está construido con las mismas especificaciones, es decir, tienen la misma geometría, campo de flujo, etc., como muestra la Figura 10.

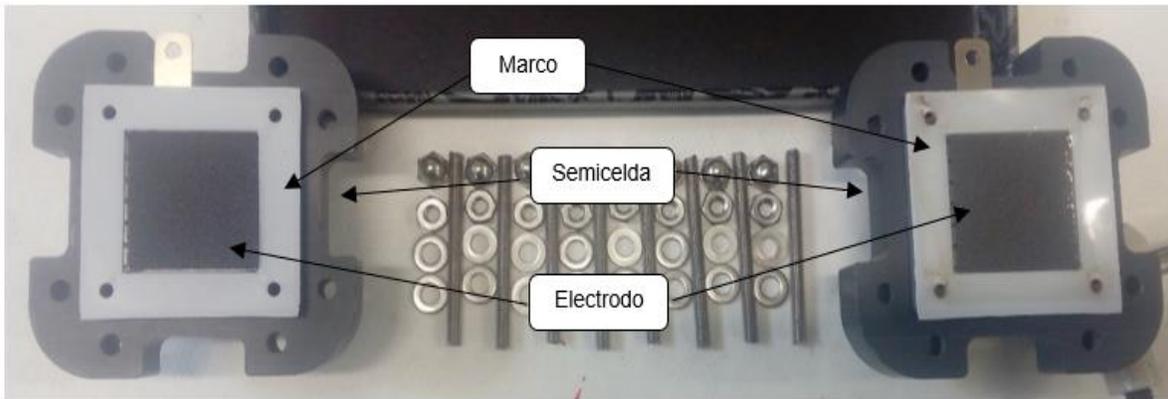


Figura 9. Partes de una celda de flujo redox marca TDM.

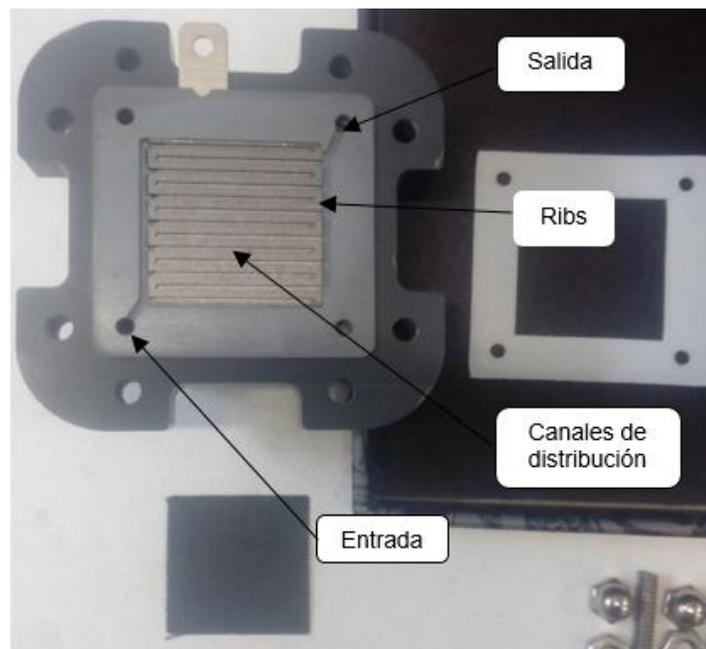


Figura 10. Características de uno de los electrodos con geometría interdigital de una celda de flujo redox.

Para la construcción del modelo se utilizó una herramienta del software que realiza el procedimiento mediante una secuencia que consiste en 22 pasos detallados en la Tabla 2, permitiendo realizar los ajustes necesarios en caso de que se requiera modificar la batería.

Tabla 2. Procedimiento de ensamblado del modelo geométrico.		
Paso	Nombre	Descripción general
1	Block 1	Tamaño y forma del área de la celda.
2	Block 2	Tamaño, forma y posición de los canales de entrada.
3	Block 3	Tamaño, forma y posición de los canales de salida.
4	Array 1	Número de canales de entrada.
5	Array 2	Número de canales de salida.
6	Union 1	Unión de objetos.
7	Difference 1	Corte de los canales de distribución.
8	Block 4	Tamaño y forma del marco.
9	Block 5	Unión entre ribs.
10	Cylinder 1	Tamaño y posición del cilindro de salida.
11	Cylinder 2	Tamaño y posición del cilindro de entrada.
12	Difference 2	Corte de los cilindros de entrada y salida.
13	Block 6	Tamaño y posición del canal de entrada.
14	Block 7	Tamaño y posición del canal de salida.
15	Block 8	Tamaño y posición de la conexión de salida.
16	Rotate 1	Angulo de rotación de la conexión de salida.
17	Rotate 2	Mismo proceso de etapas 15 y 16 para conexión de entrada.
18	Difference 3	Corte de los canales de entrada y salida.
19	Block 9	Unión entre canales de entrada, distribución y salida.
20	Difference 4	Corte de la celda.
21	Block 10	Tamaño y posición del electrodo.
22	Form Union	Unión del modelo.

Se comenzó fijando los parámetros de la Tabla 3, para utilizarlos como base en el proceso de ensamblado, los cuales están representados geoméricamente en la Figura 11.

Tabla 3. Parámetros de construcción.		
Nombre	Expresión	Valor
L carbono	50 [mm]	0.05 m
ID carbono	1 [mm]	0.001 m
OD carbono	1.5 [mm]	0.0015 m
TH carbono	1 [mm]	0.001 m
L marco	80 [mm]	0.08 m
Inlet	3 [mm]	0.003 m
TH	4 [mm]	0.004 m

A continuación se explica cada parámetro:

A) L carbono: Longitud de los lados de la celda, al tratarse de una celda cuadrada todos los lados son iguales.

B) ID carbono: Ancho de los canales de distribución.

C) OD carbono: Es una medida que se representa la distancia entre los canales de distribución y el contorno de la celda.

D) TH carbono: Representa la altura de los canales de distribución.

E) L marco: Longitud del marco en el que se monta la celda, de igual forma que en “Lcarbono” al tratarse de un cuadrado todos los lados son iguales.

F) Inlet: Diámetro de los orificios de entrada y salida.

G) TH: Altura de la celda.

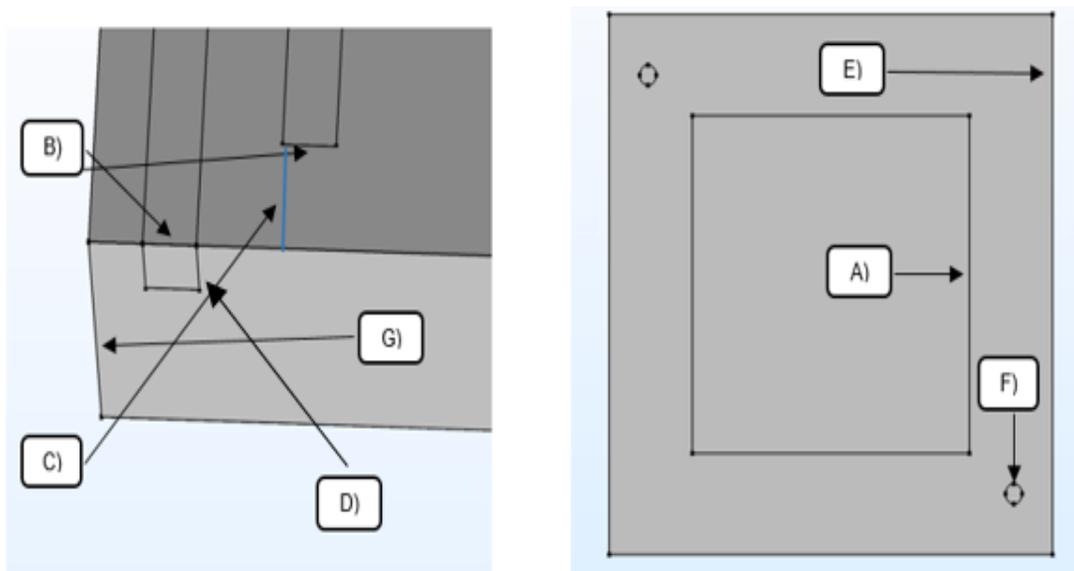


Figura 11. Representación geométrica de los parámetros de construcción.

El estudio original se enfoca en el análisis hidrodinámico en una celda similar a la unidad comercial (TDM) de geometría cuadrada de 0.05 m x 0.05 m con un campo de flujo interdigital construido de una placa monopolar de grafito, la cual incluye 20 canales (10 de entrada y 10 de salida) de 1 mm de ancho y profundidad, separados por “ribs” de grafito de 1.5 mm de ancho.

Es importante mencionar que el análisis se realizó en uno de los electrodos que componen la celda, ya que el estudio es exactamente igual para ambos electrodos, la única diferencia entre ellos es que en uno se lleva a cabo la reacción de oxidación y en el otro la de reducción.

La estructura de la celda se puede modificar manipulando cada una de los pasos de ensamblado antes mencionados, por ejemplo, el paso “Block 1” nos permite incrementar o disminuir el área efectiva de la celda, mientras que el paso “Array 1” nos da la posibilidad de elegir la cantidad de canales de entrada deseados, así como el ancho, largo, profundidad, etc. Los primeros 7 pasos, son los encargados de construir la geometría y el campo de flujo en la celda, hasta obtener la forma que muestra la Figura 12.

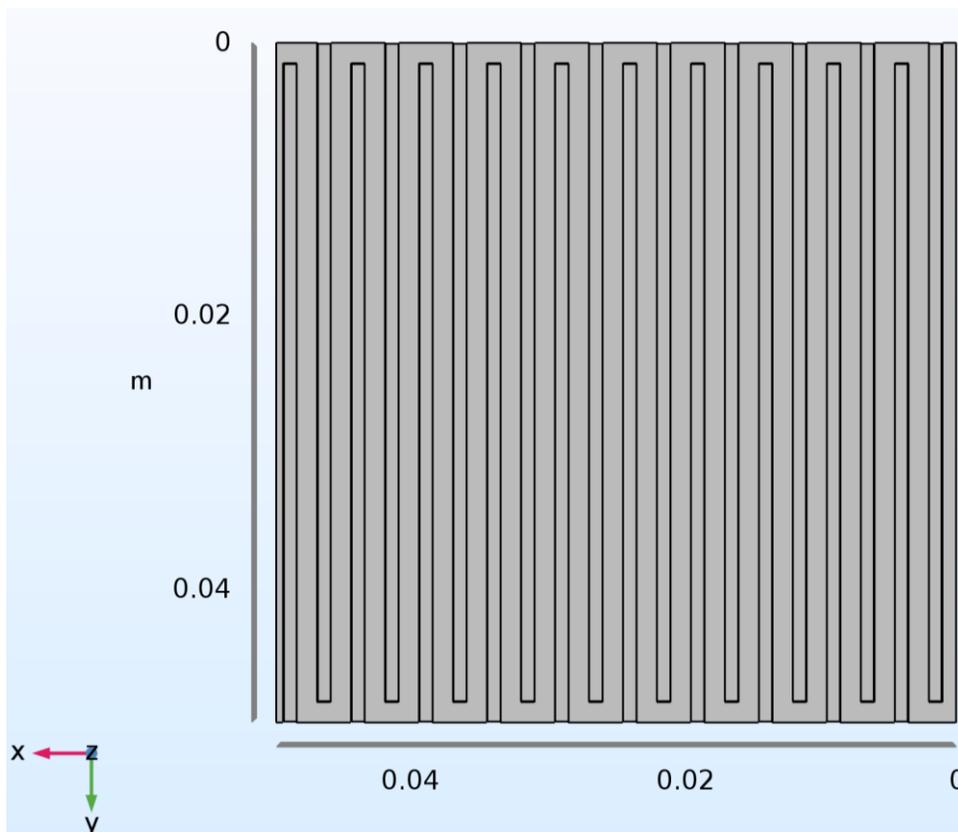


Figura 12. Canales de distribución de la celda separados por “ribs”.

Continuando la secuencia, se procede a construir un marco de 0.08 m x 0.08 m dentro del que se construirán los orificios y tuberías de entrada y salida a la celda, en este caso las tuberías son de 0.05 m de largo y 0.002 m y los orificios tienen un diámetro de 0.003 m, todo esto tiene lugar en los pasos 8 a 19, en donde se obtiene la forma de la Figura 13, la cual nos da una perspectiva por encima y por debajo del modelo.

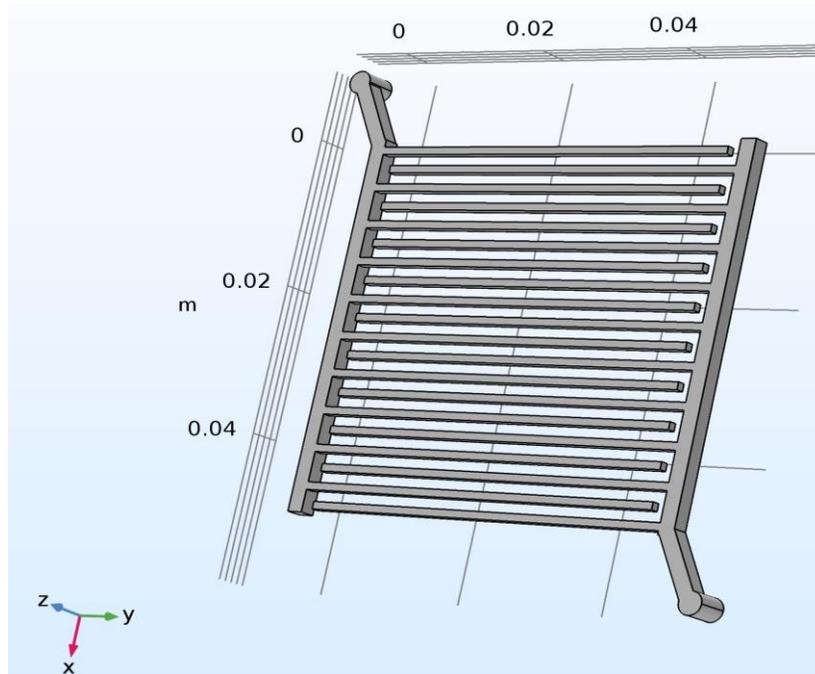


Figura 13. Canales de entrada, distribución y salida de la celda.

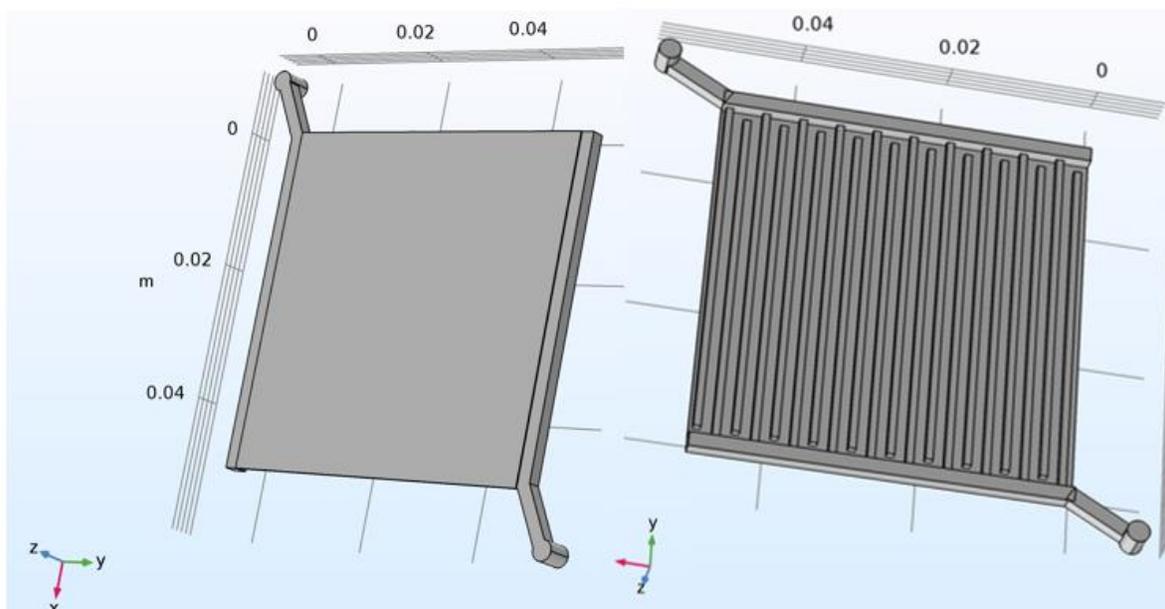


Figura 14. Vista 3D del volumen ocupado por el fluido.

Por último, se construye el electrodo, el cual está hecho de una tela de carbono y se instala por encima de los canales de distribución, debe ser del mismo tamaño que el área de la celda, es decir, 2500 mm². El modelo se muestra en la Figura 14.

3.2 Modelado hidrodinámico de la celda.

Flujo en medio libre y poroso

Como se explica en el capítulo 2, existen diversos modelos matemáticos desarrollados para el estudio de la mecánica de fluidos, y la decisión de utilizar uno u otro depende de la naturaleza del problema que se busque resolver.

En este caso, al tratarse de un fluido que viaja a través de canales de distribución hablamos de flujo en medio libre, pero como en el proceso de operación el fluido es obligado a atravesar el electrodo formado por la tela de carbono, se debe de considerar el modelo de flujo en medio poroso, es decir, en este tipo de dispositivos se utiliza un modelo híbrido llamado “flujo en medio libre y poroso” el cual está representado por las ecuaciones de Navier - Stokes para el medio libre y las ecuaciones de Brinkman para el medio poroso.

Las ecuaciones de Navier - Stokes rigen la dinámica de fluidos. Estas ecuaciones se utilizan para obtener el campo de velocidad dentro del sistema y permiten predecir el comportamiento del fluido en cada región, es importante mencionar que son sólo una aproximación del comportamiento real de los fluidos.

El movimiento del fluido se puede obtener a partir de la segunda ley de Newton la cual establece que la rapidez de cambio de momentum de una partícula de fluido es igual a la suma de las fuerzas que están actuando sobre el fluido [17].

$$\begin{array}{l} \textit{Rapidez de cambio} \\ \textit{de momentum en una} \\ \textit{partícula de fluido.} \end{array} = \begin{array}{l} \textit{Suma de las fuerzas} \\ \textit{que estan actuando} \\ \textit{sobre la partícula.} \end{array}$$

Clasificándose las fuerzas en:

Fuerzas Superficiales: La fuerza causada por la diferencia de presiones, la fuerza debida a la viscosidad, la tensión superficial.

Fuerzas Externas: La fuerza de gravedad, la fuerza centrífuga, efecto Coriolis, fuerzas electromagnéticas, etc.

Ecuación de Navier Stokes para números de Reynolds bajos, flujo incompresible en medio libre y en estado estacionario, se puede escribir como [9]:

$$\rho(u \cdot \nabla)u = \nabla \cdot [-p + \mu(\nabla u + (\nabla u)^T)] + F \quad (29)$$

La ecuación de continuidad es:

$$\rho \nabla \cdot u = 0 \quad (30)$$

En donde:

- ρ : Densidad del fluido.
- u : Velocidad promedio del fluido.
- μ : Viscosidad dinámica del fluido.
- p : Presión del sistema.
- F : Fuerzas externas.
- ∇ : Operador Nabla.

Ecuación de Brinkman para números de Reynolds bajos, flujo incompresible en medio poroso, es [9]:

$$\frac{\rho}{\varepsilon_p} \left((u \cdot \nabla) \frac{u}{\varepsilon_p} \right) = \nabla \cdot \left[-p + \frac{\mu}{\varepsilon_p} (\nabla u + (\nabla u)^T) - \frac{2\mu}{\varepsilon_p} (\nabla \cdot u) \right] - \left(\mu \kappa^{-1} + \beta_F |u| + \frac{Q_{br}}{\varepsilon_p^2} \right) u + F \quad (31)$$

$$\rho \nabla \cdot u = Q_{br} = 0 \quad (32)$$

Donde:

- Q_{br} : Término fuente.
- F : Fuerzas externas.
- β_F : Coeficiente Forchheimer.
- ε_p : Porosidad del electrodo.
- κ : Permeabilidad del electrodo.

Estado estacionario

El estado estacionario de un sistema que está en equilibrio se define como aquel en el que la tasa de cambio de las variables de estado es constante respecto al tiempo, es decir, matemáticamente hablando, la derivada parcial de una variable x respecto al tiempo es igual a cero.

$$\frac{\delta x}{\delta t} = 0 \quad (33)$$

3.3 Diseño del plan de simulación.

El plan de trabajo consistió en estudiar el comportamiento hidrodinámico en una CFR realizando simulaciones en COMSOL Multiphysics® 5.3 bajo diferentes condiciones.

Se realizaron simulaciones construyendo figuras a escala de la celda de estudio original, para analizar el efecto de área de la celda sin alterar las proporciones de la misma y, además, se construyeron figuras con el mismo tamaño de las celdas escaladas, en las que se modificó el número de canales y sus parámetros para poder comparar los resultados.

Número	Nombre	Área
1	Celda Original	2500 [mm ²]
2	Celda Esc 1.2	3600 [mm ²]
3	Celda Esc 1.2 CA	3600 [mm ²]
4	Celda Esc 1.5	5625 [mm ²]
5	Celda Esc 1.5 CA	5625 [mm ²]
6	Celda Esc 2.0	10000 [mm ²]
7	Celda Esc 2.0 CA	10000 [mm ²]
8	Celda Esc 6.5	1000 [cm ²]
9	Celda Esc 6.5 CA	1000 [cm ²]

*Esc: A escala.

*CA: Canales arreglados (Se modifican los parámetros de los canales para que mantengan el tamaño de la celda original).

El proceso de simulación consistió en construir la figura, elegir el modelo matemático, el tipo de estudio y resolver las ecuaciones de movimiento. Se seleccionan los dominios de la Figura 15, y se fijan los valores de operación.

El siguiente paso fue seleccionar una malla, para esto se realizó el estudio de mallado respectivo para poder afirmar que los resultados son representativos e independientes del tamaño de malla.

Mallado	Elementos generados
Extremadamente grueso	40058
Extra grueso	73966
Más grueso	140339
Grueso	296198
Normal	1198191

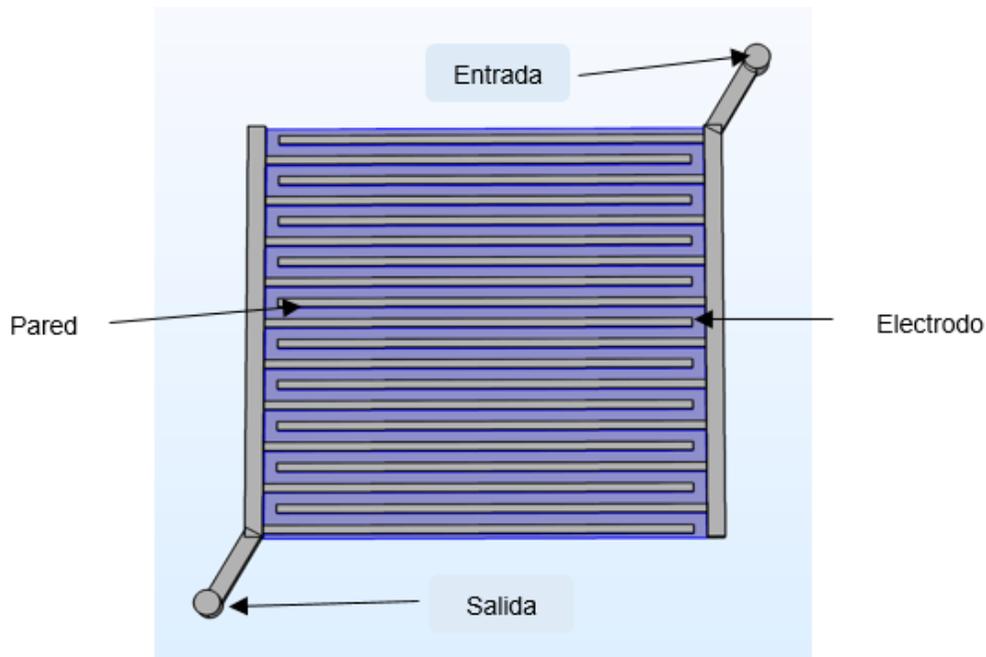


Figura 15. Dominios de la CFR.

La elección de un mallado adecuado es fundamental a la hora de obtener una solución lo más exacta posible y sobre todo, en términos de ahorro de tiempo, ya que no solo importa el tiempo empleado en la construcción del mallado sino también el tiempo de cálculo que depende del mallado seleccionado. Como se observa en la Figura 16 entre más fino es el mallado, mayor es la cantidad de elementos generados como muestra la Tabla 5, lo que dificulta los cálculos incluso para el software.

Para poder observar el efecto del flujo en la celda, cada una de las simulaciones mencionadas en la Tabla 4 se sometieron a un barrido paramétrico con valores de flujo volumétrico en un rango de 10 a 100 cm³/min. Después de todos estos pasos, se elige el método de iteración, se fija el error y el número de iteraciones máximas y se procede a la simulación.

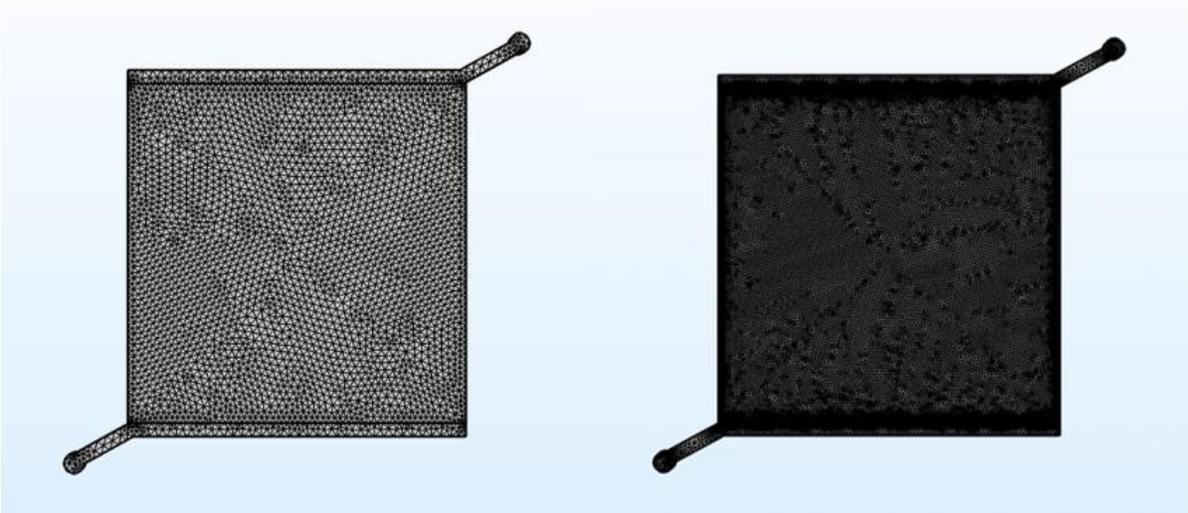


Figura 16. Comparación entre el mallado extremadamente grueso y normal.

3.4 Condiciones físicas y a la frontera.

El estudio se realizó utilizando agua en condiciones estándar como primera aproximación, los valores que se darán a continuación son los indicados para el estudio de una celda 3D de 2500 mm².

Las condiciones de la simulación y propiedades del fluido son:

Presión (p) = 1 atm.

Temperatura (T) = 293.15 K.

Densidad (ρ) = 999.62 kg/m³.

Viscosidad dinámica (μ) = 0.001 Pa*s.

Condiciones de entrada:

Flujo volumétrico: 10 – 100 cm³/min.

Condiciones en la pared:

Velocidad (v) = 0 m/s.

Se seleccionó una pared sin deslizamiento.

Condiciones en el electrodo:

Porosidad (ϵ_p) = 0.9.

Permeabilidad isotrópica (κ) = 1×10^{-10} m².

Condiciones de salida:

Presión de salida (p_0) = 0 Pa.

Reflujo suprimido.

Capítulo 4.

4. Resultados.

En este capítulo se presentan los resultados de las simulaciones del estudio hidrodinámico en 4 partes. La sección 4.1 describe el estudio de mallado, en la 4.2 se revisa el desempeño de la celda, mientras que en la 4.3 se analiza el efecto del área en el rendimiento de la celda, y finalmente en la 4.4 observamos el efecto de manipular los parámetros de los canales de distribución de la celda.

4.1 Estudio de mallado.

El estudio de mallado se realizó en la celda original de 2500 mm² de área activa, con distintas opciones de mallado yendo de mayor a menor grosor para un flujo volumétrico de 25 cm³/min, mientras que las condiciones físicas y a la frontera no se alteran. Los resultados de caída de presión, como una de las variables más importantes del estudio, para cinco diferentes tipos de mallado se muestran en la Tabla 6.

	Mallado	Elementos generados	Velocidad (m/s)	Caída de Presión (Pa)
1	Extremadamente grueso	40058	0.18	152.4
2	Extra grueso	73966	0.18	143.67
3	Más grueso	140339	0.18	145.73
4	Grueso	296198	0.18	145.5
5	Normal	1198191	0.18	145.97

Como se puede observar en la Figura 17, la gráfica tiene la tendencia hacia una línea recta de valor constante de caída de presión, siendo esta tendencia el resultado que se busca en un estudio de mallado. Este comportamiento nos indica que la diferencia entre los resultados es mínima, después de 140339 elementos de malla, y se puede afirmar que estos son representativos para cualquier malla dentro de la línea recta.

Estos resultados nos permiten construir la malla en el dominio de simulación teniendo la certeza de que los resultados son independientes del tipo de mallado. Es importante mencionar que el software dispone de 4 tipos más de mallado más finos, pero se consideró suficiente utilizar el mallado tipo 3 (Figura 18) para evitar tiempos excesivos de cómputo.

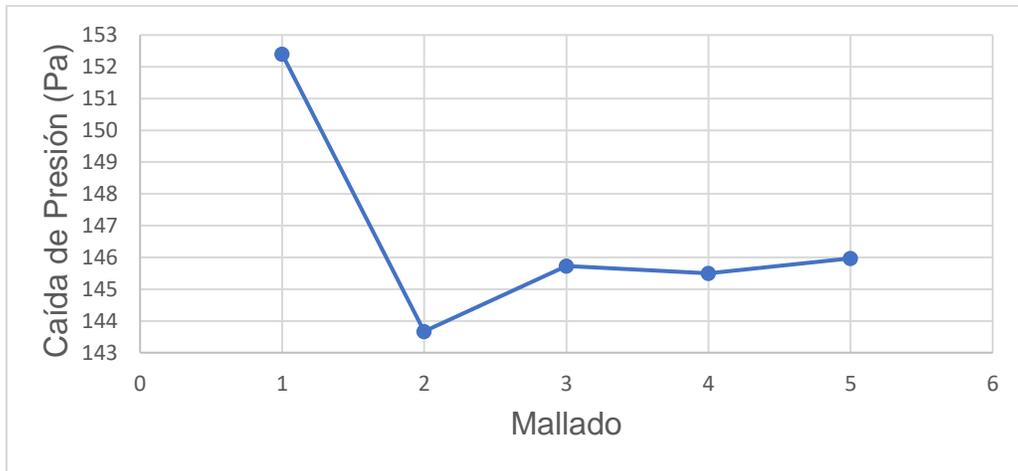


Figura 17. Caída de presión en función del mallado utilizado.

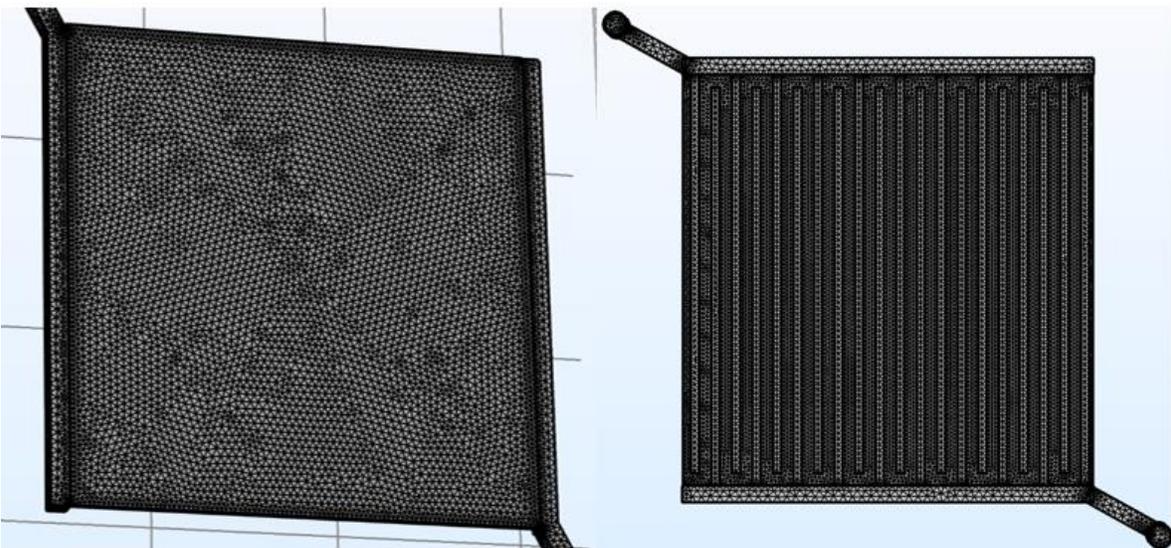


Figura 18. Mallado tipo 3 generado en el electrodo y canales de distribución.

4.2 Estudio hidrodinámico de la celda.

Como se indica en la introducción de este capítulo, en este apartado se analizarán los resultados del estudio hidrodinámico en una celda base de 2500 mm². Las simulaciones se llevaron a cabo a diferentes valores de flujo másico como parámetro. El barrido paramétrico realizado arroja los resultados de forma gráfica en la Figura 19.

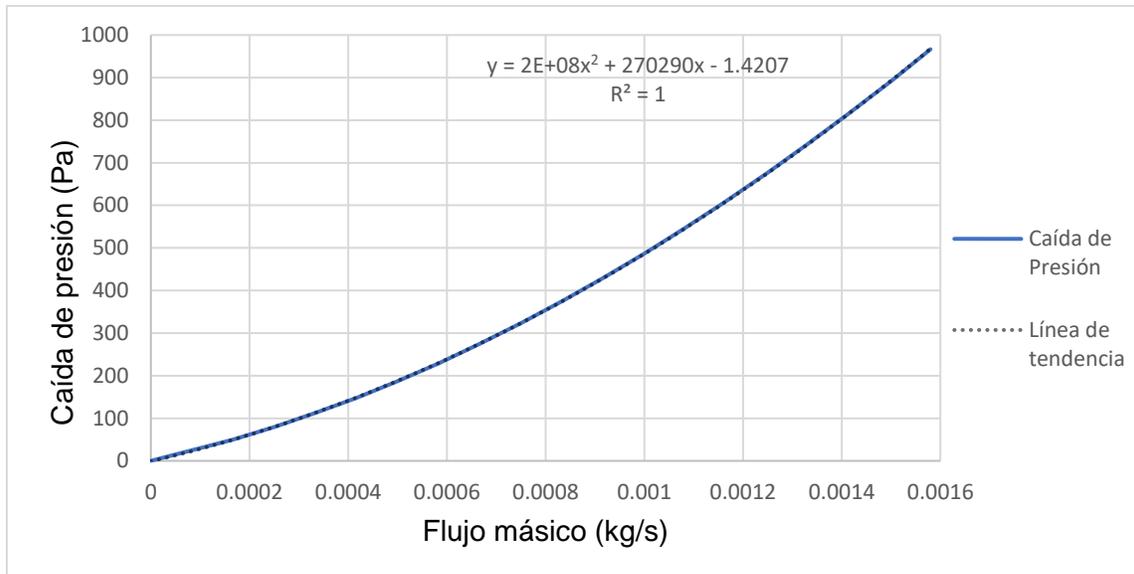


Figura 19. Caída de presión en función del flujo másico en celda de 2500 mm².

Se puede observar que la gráfica resultante de la caída de presión en función del flujo másico tiende a ajustarse a una línea de tendencia polinómica de orden 2, lo cual se puede interpretar como que los valores resultantes aumentan en un ritmo en concreto, representado por la ecuación presentada en el gráfico y se puede extrapolar para predecir comportamientos fuera de los rangos de estudio.

4.2.1 Caída de presión y velocidad en los canales.

La trayectoria del fluido se puede seguir con el valor de la caída de presión dentro de la celda. Una de las condiciones a la frontera es que la presión de salida es cero. La Figura 20 es una representación de la distribución de presión desde la perspectiva de los canales de distribución en un gráfico 3D. La escala de colores indica la magnitud de la presión en Pa.

La presión en el ducto circular de entrada es de 147 Pa (color rojo intenso en la Figura 20) y se observa que la presión en cada canal de entrada disminuye conforme el líquido atraviesa el electrodo poroso hacia los canales de salida. La diferencia entre la presión de los canales de entrada y los de salida en cada punto es la fuerza motriz que precisamente impulsa el líquido a atravesar el electrodo.

La Figura 22 se obtuvo realizando un corte 3D entre dos puntos dentro de la celda en las coordenadas de la Tabla 7 representados en la Figura 21. El corte corresponde a una línea a la mitad de la altura de la celda y a la mitad de su espesor. Esta figura nos indica el valor de la presión calculada dentro de la celda en los canales según su posición en el eje x.

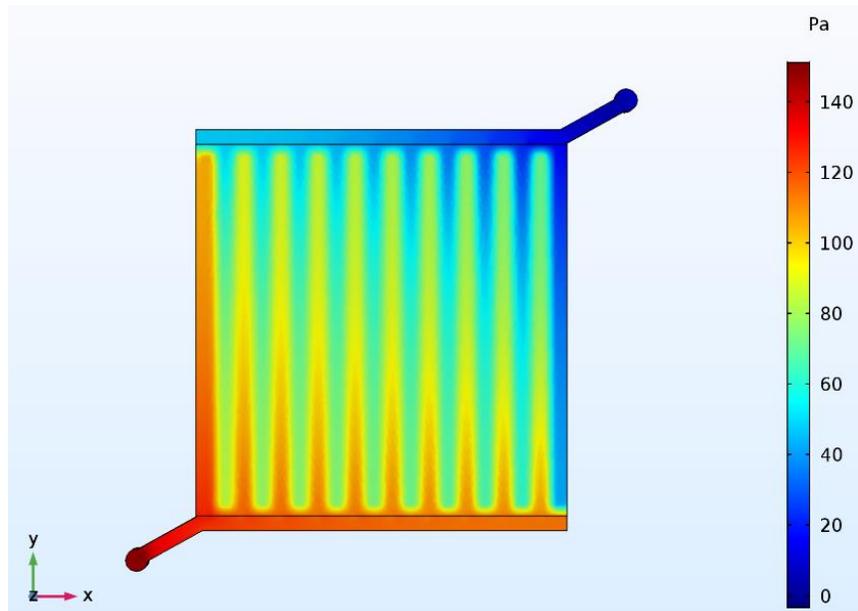


Figura 20. Gráfico de volumen 3D de caída de presión para un flujo de 25 cm³/min.

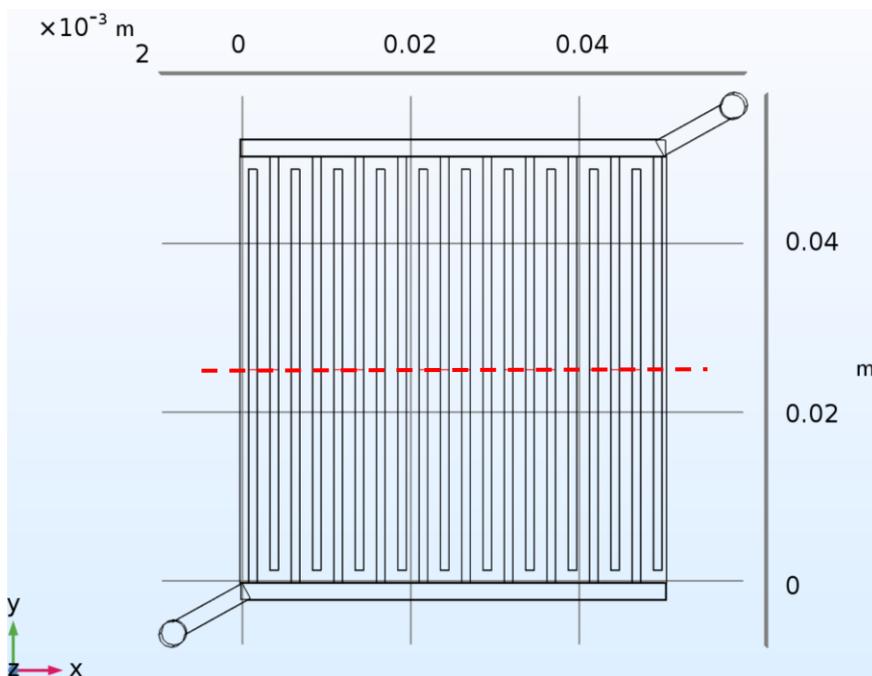


Figura 21. Corte 3D entre dos puntos dentro de la celda de 2500 mm².

Recordando que la geometría interdigital presenta una alternancia respecto a los canales de entrada y salida, se puede observar que el valor de 112 Pa corresponde al primer canal de entrada mientras que el valor de 75 Pa sería del primer canal de salida, repitiendo este patrón hasta la salida. Además secunda la afirmación basada en la Figura 20 de que la presión disminuye hacia los canales de salida. Es interesante notar que las diferencias de presión entre canales de entrada y salida no son iguales aun cuando todos los canales son iguales.

Esto significa que el líquido en un canal de entrada alimenta preferentemente los canales de salida que se encuentran a su derecha en la Figura 22.

También es notorio el comportamiento diferente de los canales en los extremos de la celda donde la diferencia de presión entre el canal de entrada y el de salida es mucho más grande al de los demás canales. Esto se debe a que el primer canal de entrada alimenta un solo canal de salida mientras todos los demás canales de entrada alimentan dos canales de salida. De manera similar, el último canal de salida es alimentado por un solo canal de entrada mientras todos los demás canales de salida son alimentados por dos canales de entrada.

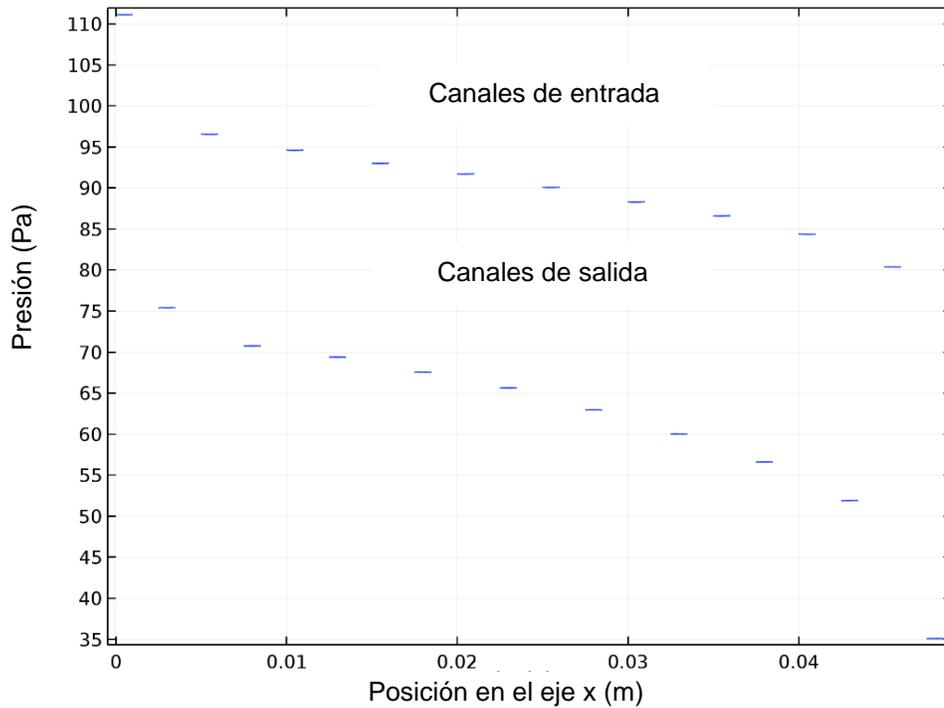


Figura 22. Gráfico 1D de la presión en los canales, con una línea de corte 3D entre dos puntos para un flujo de 25 cm³/min.

Tabla 7. Coordenadas de los puntos de corte en la figura 21,22 y 26.			
	x (m)	y (m)	z (m)
Punto 1	0.0	0.025	0.035
Punto 2	1.0	0.025	0.035

Haciendo cortes dentro del modelo de la celda con diferentes orientaciones y distintos planos podemos observar las distintas velocidades que toma el fluido en los canales de distribución según la zona en que este se encuentre.

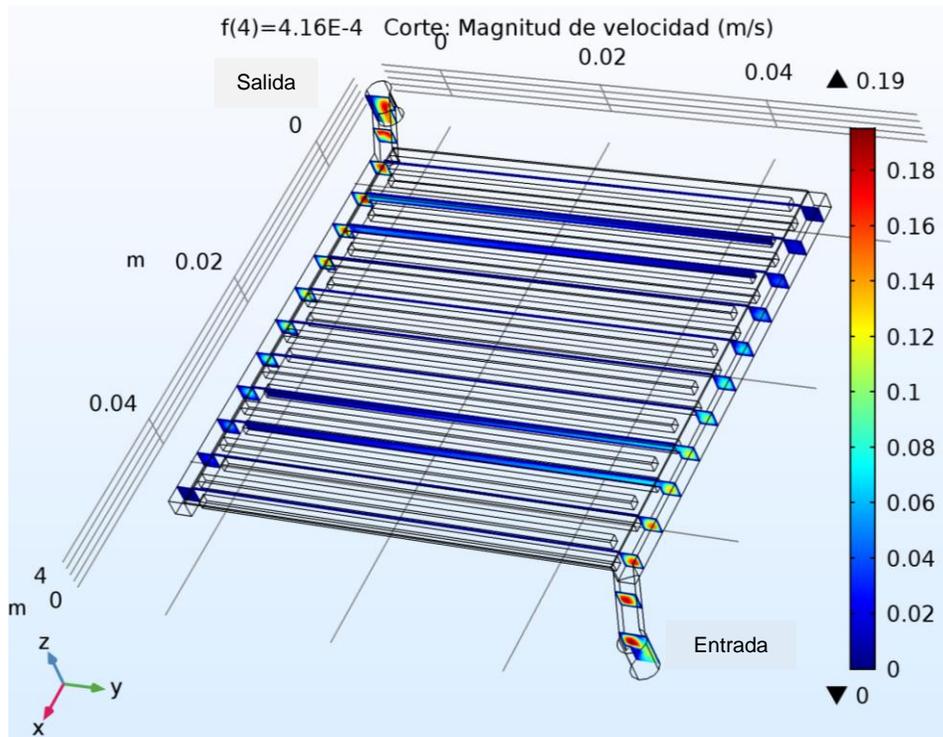


Figura 23. Velocidad en un plano de corte YZ y 15 planos para un flujo de 25 cm³/min.

Las Figuras 23 y 24 nos dan una perspectiva en distintos ángulos del eje tridimensional de la celda. En estas figuras se representa la magnitud de la velocidad mediante la escala de colores en m/s.

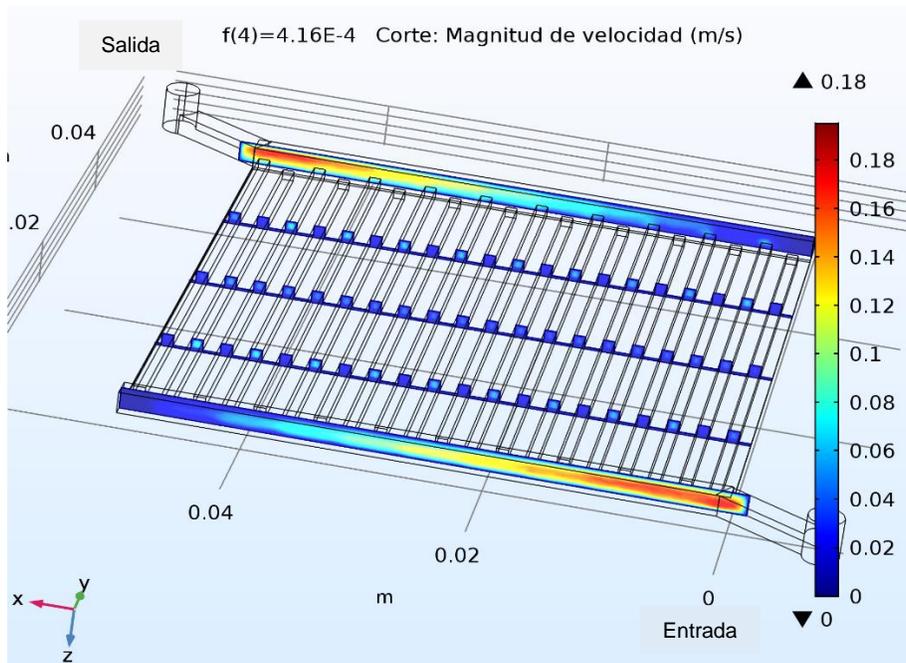


Figura 24. Velocidad en un plano de corte ZX y 5 planos para un flujo de 25 cm³/min.

Estas figuras muestran claramente el funcionamiento de los canales principales (canales primarios) de entrada y salida que alimentan los canales de entrada y salida del arreglo interdigital. La velocidad disminuye conforme se alimentan los canales de entrada, generando una distribución uniforme en los canales.

En el caso del canal de distribución de salida el proceso se invierte y conforme los canales de salida alimentan al canal distribuidor de salida la velocidad aumenta. La Figura 25 nos muestra que las velocidades más altas se alcanzan a la salida y entrada de la celda, y en el centro de los canales. Es importante destacar que esta figura no incluye la velocidad en el electrodo. Una representación más clara de la velocidad dentro de cada canal del arreglo interdigital se muestra en la Figura 26.

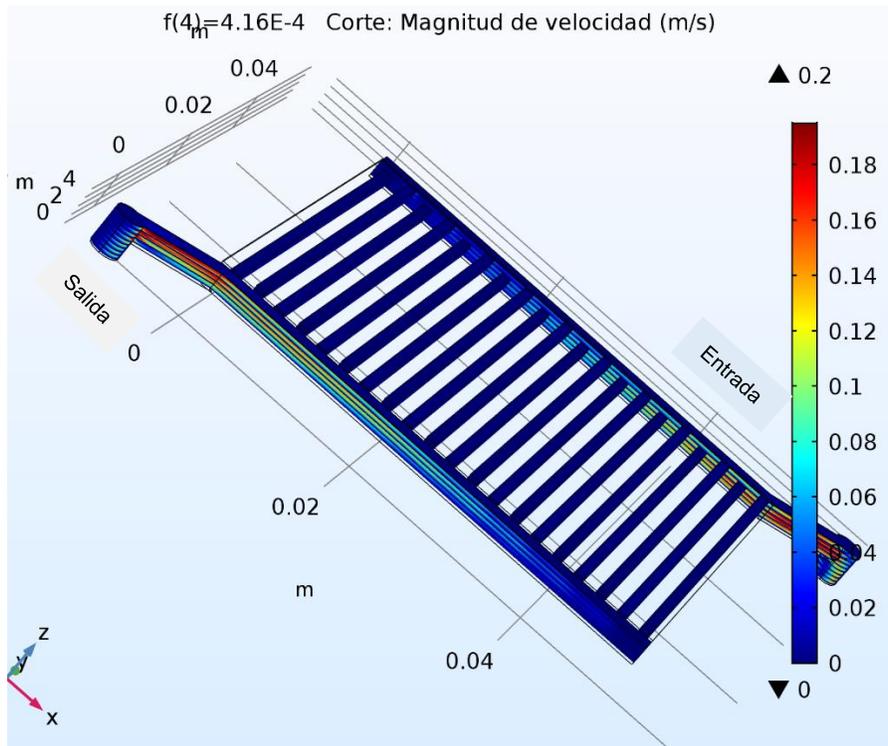


Figura 25. Velocidad en un plano de corte XY y 10 planos para un flujo de 25 cm^3/min .

Siguiendo el mismo procedimiento para la obtención de la Figura 22, se obtuvo la Figura 26, la cual es representativa para los valores de velocidad alcanzados en los canales en las coordenadas descritas por la Tabla 7 (a la mitad de la altura de la celda y la mitad de su espesor). Esta figura nos permite interpretar que las velocidades en los canales fluctúan según la posición en el eje x , y el máximo de velocidad se encuentra en un rango entre los 0.025 y 0.05 m/s.

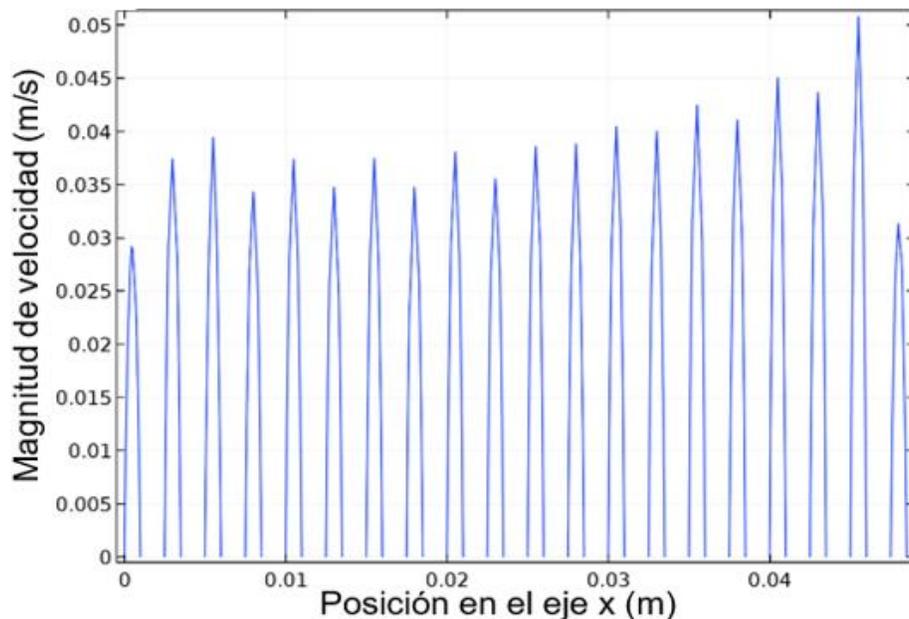


Figura 26. Gráfico 1D de la velocidad en los canales, con una línea de corte 3D entre dos puntos para un flujo de $25 \text{ cm}^3/\text{min}$.

Siguiendo el mismo procedimiento para la obtención de la Figura 22, se obtuvo la Figura 26, la cual es representativa para los valores de velocidad alcanzados en los canales en las coordenadas descritas por la Tabla 7 (a la mitad de la altura de la celda y la mitad de su espesor). Esta figura nos permite interpretar que las velocidades en los canales fluctúan según la posición en el eje x, y el máximo de velocidad se encuentra en un rango entre los 0.025 y 0.05 m/s.

4.2.2 Caída de presión y velocidad en el electrodo.

Para la obtención de las Figuras 28 y 29 fue necesario realizar un corte en un plano XY a la mitad del espesor del electrodo (0.001 m), mostrado en la Figura 27.

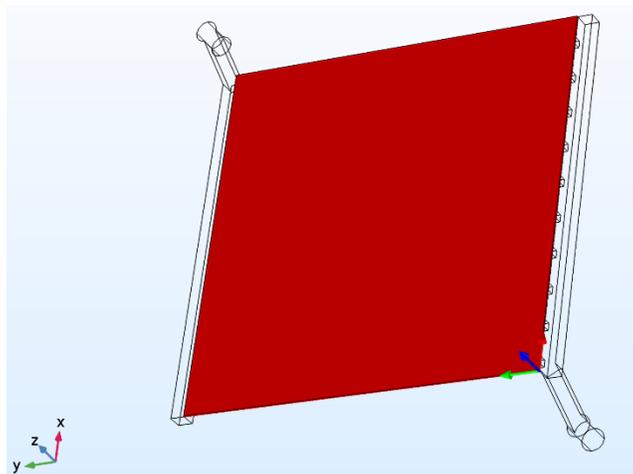


Figura 27. Plano de corte XY en la coordenada $z = 0.0041 \text{ m}$.

La Figura 28 consiste en una representación de la presión registrada en cada coordenada dentro del electrodo y, de igual forma que ocurría en los canales la presión disminuye conforme se aproxima a la salida. Se observan las zonas en contacto con los canales de entrada y salida y la diferencia de presión entre ellas indicando la forma en la que el líquido atraviesa el electrodo en dirección de mayor a menor presión.

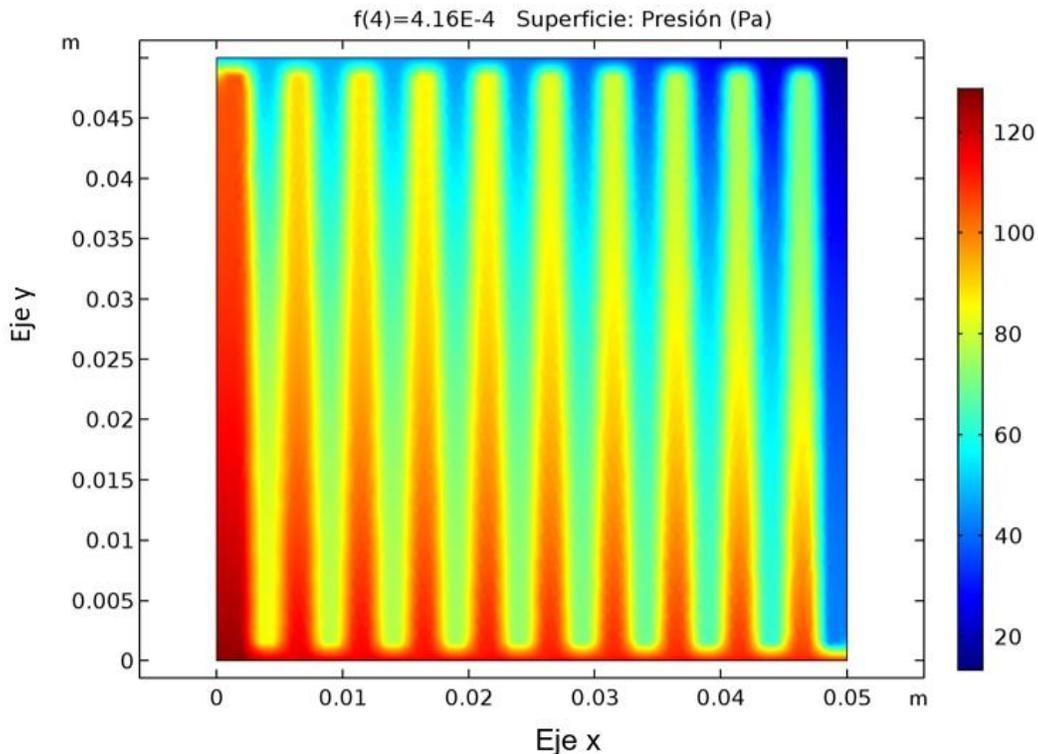


Figura 28. Caída de presión en un plano de corte XY coordenada $z = 0.0041$ m en el electrodo para un flujo de $25 \text{ cm}^3/\text{min}$.

La Figura 29 en cambio, nos muestra la velocidad alcanzada dentro del electrodo, que como se puede observar son velocidades extremadamente bajas (0.003 m/s en promedio) lo que puede ser un indicador del tiempo de residencia en el electrodo. Las zonas de mayor velocidad (zonas más claras en la Figura 29) corresponden con las zonas que conectan los canales de entrada con los de salida por debajo de la parte sólida del electrodo monopolar (rib). Estas zonas son las más activas donde se llevan a cabo las reacciones electroquímicas.

El patrón de flujo generado por la geometría interdigital nos indica que el líquido atraviesa el electrodo poroso en una distancia muy corta dando lugar a bajos tiempos de residencia en las zonas de mayor actividad del electrodo. Las regiones de color azul en la Figura 29 muestran zonas estancadas o de muy baja velocidad las cuales contribuyen muy poco a la conversión de los reactivos en productos.

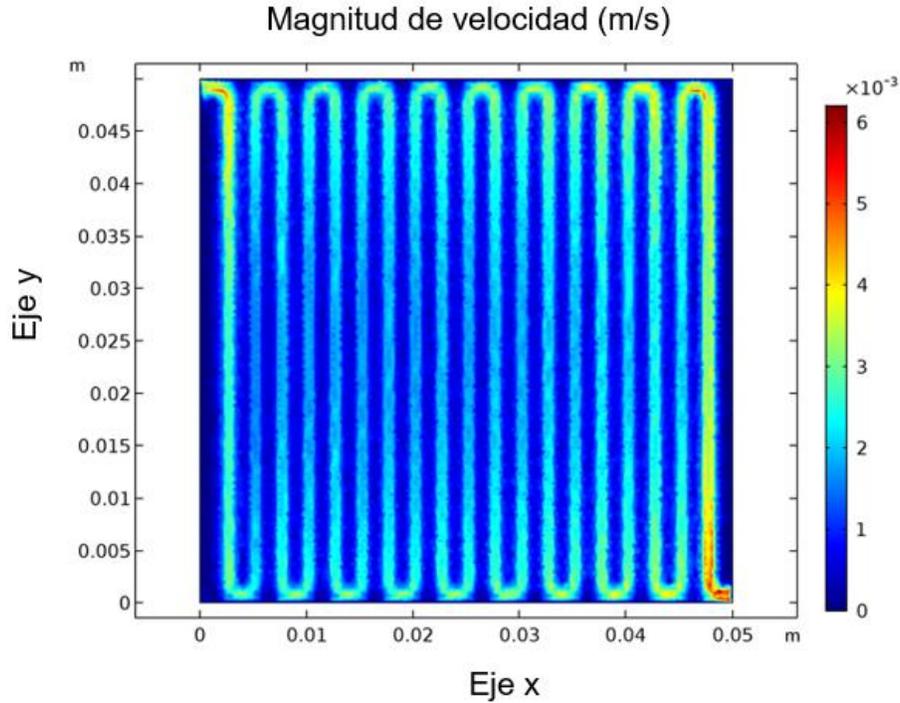


Figura 29. Velocidad en un plano de corte XY coordenada $z = 0.0041$ m en el electrodo para un flujo de $25 \text{ cm}^3/\text{min}$.

4.3 Efecto del área en la celda.

En este apartado se analiza el efecto en la caída de presión al aplicar un escalado a la celda original completa con el fin de trabajar con áreas de mayor tamaño sin manipular el grosor y el número de los canales de distribución (exceptuando su respectivo escalado).

Tabla 8. Parámetros de las celdas escaladas.

	Área	Ancho canales (m)	Distancia entre canales (m)	# de canales
Celda original	2500 (mm^2)	0.001	0.0015	20
Celda Esc 1.2	3600 (mm^2)	0.0012	0.0018	20
Celda Esc 1.5	5625 (mm^2)	0.0015	0.00225	20
Celda Esc 2.0	7500 (mm^2)	0.002	0.003	20

Los resultados de los barridos paramétricos realizados en cada una de las celdas descritas en la Tabla 8 se representan en la Figura 30, en la que a primera vista se puede observar que conforme aumenta el área de la celda, la caída de presión disminuye siendo este efecto más notorio en los flujos más elevados. Este es un resultado esperado porque el área de sección transversal para el paso del fluido aumenta en todas las zonas de la celda, es decir en los canales y en el electrodo poroso. Este tipo de escalado permite a la celda manejar mayores flujos másicos de líquido.

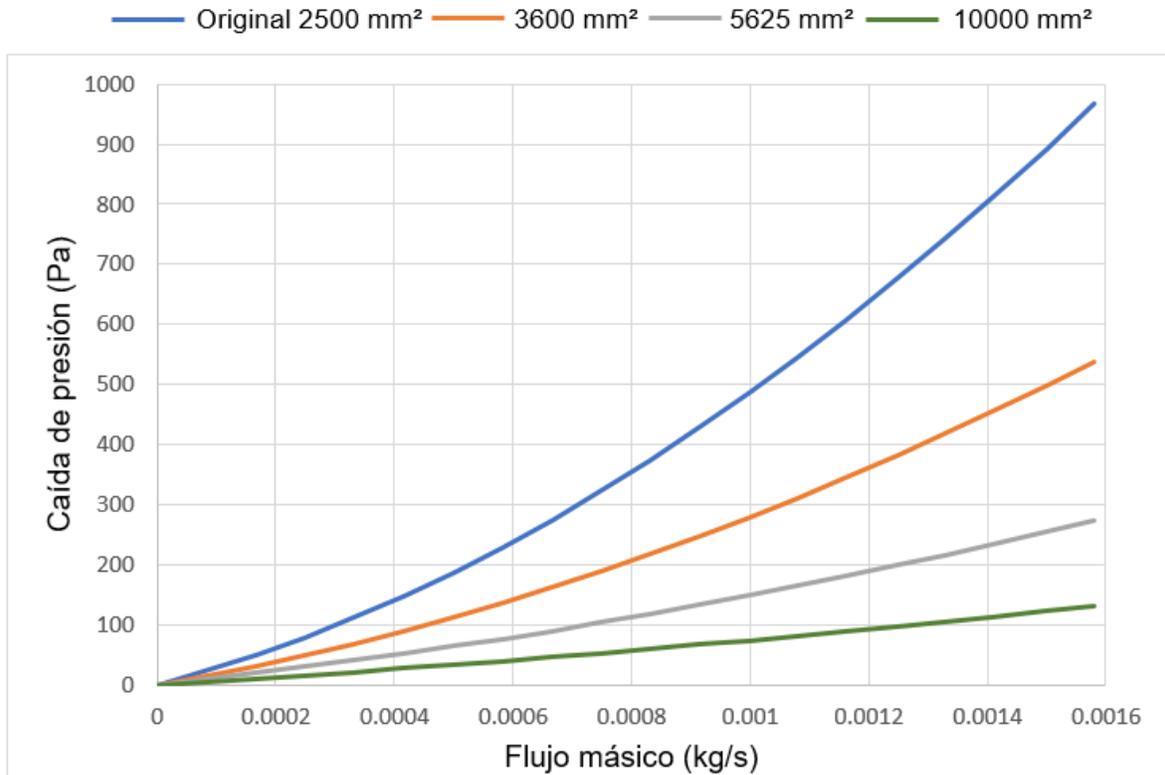


Figura 30. Comparación de los resultados de caída de presión en función del flujo másico en celdas de distintas áreas.

Es importante notar que un aumento en el ancho de los canales aumenta el área de del electrodo con menor actividad por lo que no es conveniente aumentarla demasiado. Por otro lado el aumento en el espesor del electrodo tampoco es muy conveniente porque la reacción electroquímica se lleva a cabo muy cerca de la unión del electrodo poroso y la membrana siendo poco utilizable la zona del electrodo lejana a la membrana en electrodos muy gruesos. Adicionalmente, electrodos muy gruesos causan una mayor caída de potencial eléctrico.

Para eliminar el efecto del escalado en el grosor y distancia de los canales de distribución se realizaron simulaciones en las celdas descritas en la Tabla 9, las cuales presentan un área similar a las escaladas pero mantienen el grosor y distancia de los canales originales para así poder comparar los resultados con los obtenidos en la Figura 30.

	Área	Ancho canales (m)	Distancia entre canales (m)	# de canales
Celda original	2500 (mm ²)	0.001	0.0015	20
Celda Esc 1.2 CA	3600 (mm ²)	0.001	0.0015	24
Celda Esc 1.5 CA	5625 (mm ²)	0.001	0.0015	30
Celda Esc 2.0 CA	7500 (mm ²)	0.001	0.0015	40

Los resultados se presentan en la Figura 31, la cual nos proporciona la gráfica resultante de todas las simulaciones mencionadas hasta este momento.

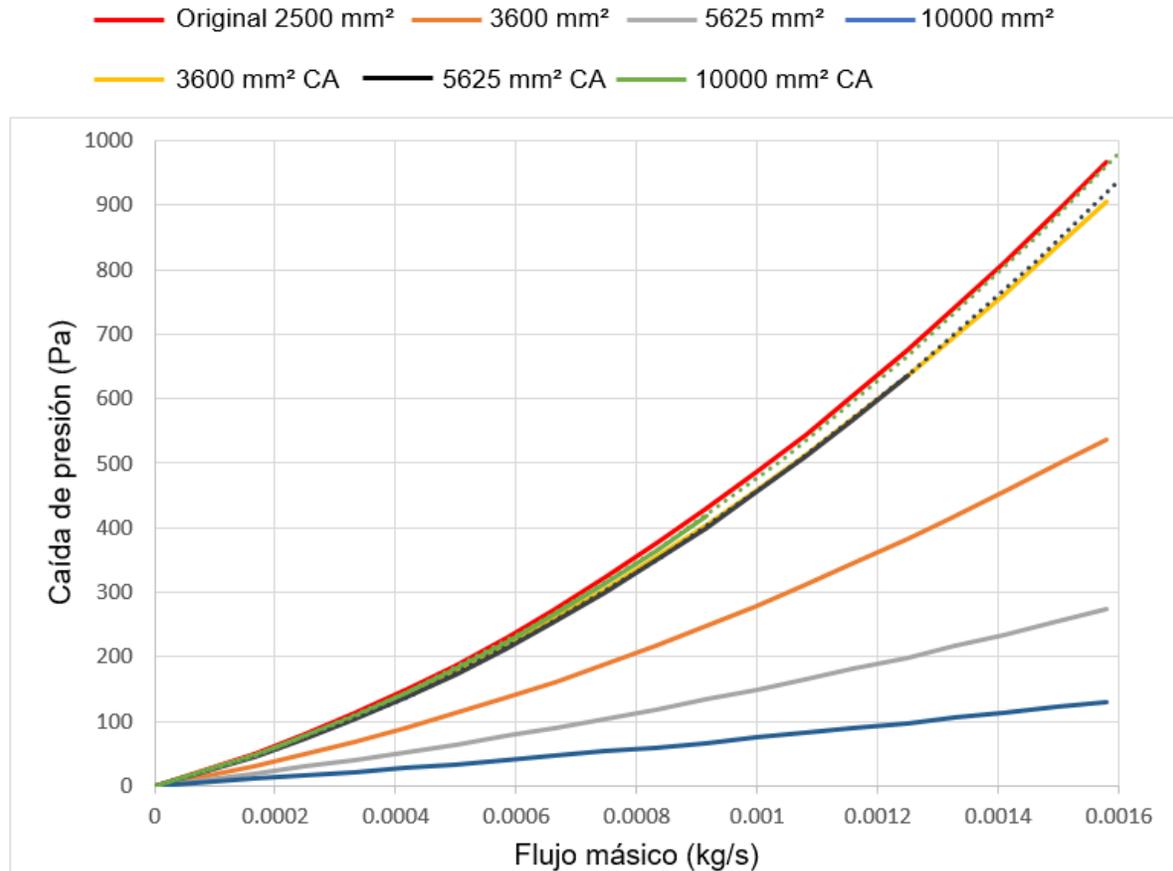


Figura 31. Comparación de los resultados de caída de presión en función del flujo másico en celdas de distintas áreas y mayor número de canales de distribución.

Las simulaciones de celdas que presentan las caídas de presión más bajas son aquellas construidas con factores de escalado más grandes, mientras que en las celdas en las que se manipuló el tamaño de los canales, a pesar de ser de áreas similares a los respectivos escalados, muestran que entre mayor área mayor es la caída de presión.

Estos resultados se los atribuimos a mantener el grosor original de 1 mm. Para utilizar este grosor se debe aumentar el número de canales hasta completar el espacio de la celda, por lo tanto, entre mayor área efectiva, mayor es la cantidad de canales de distribución utilizados y este aumento contribuye a la caída de presión, un ejemplo de una geometría con mayor número de canales se aprecia en la Figura 32. Para poder confirmar el efecto del tamaño de los canales en la caída de presión en las celdas se realizaron simulaciones en 2 celdas de 1000 cm² cada una. Los parámetros geométricos de ambas celdas se muestran en la Tabla 10.

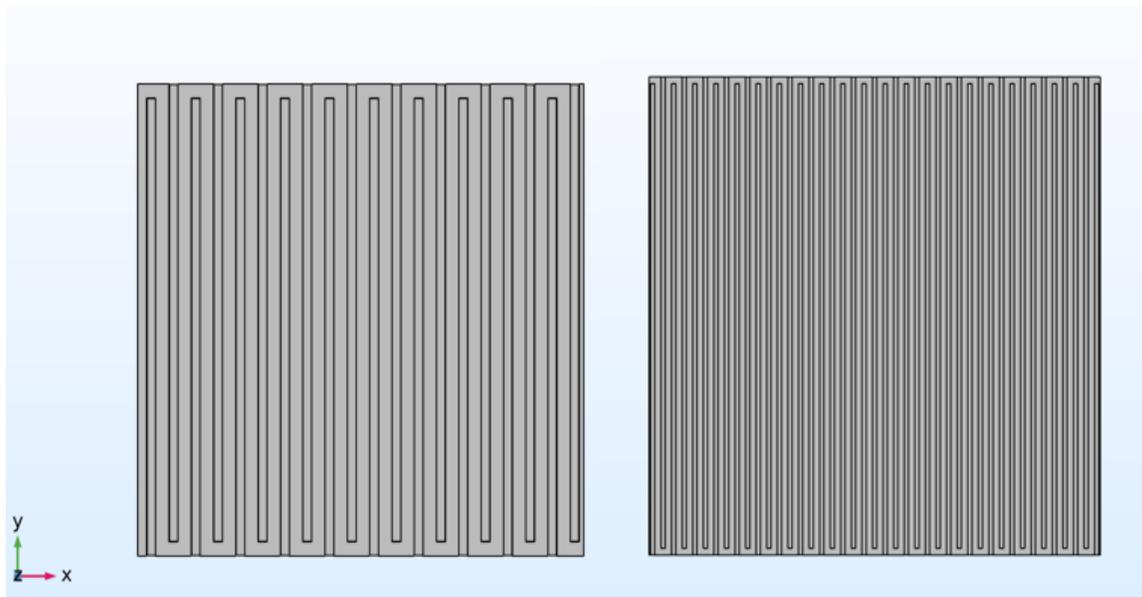


Figura 32. Comparación entre celdas de 1000 cm² y diferente número de canales.

Para compensar el aumento en el tamaño se incrementó el flujo volumétrico a un rango entre 500 – 1000 cm³/min.

Tabla 10. Parámetros de las celdas con área de 1000 cm².

	Área	Ancho canales (m)	Distancia entre canales (m)	# de canales
Celda Esc 6.5	1000 (cm ²)	0.0065	0.00975	20
Celda Esc 6.5 CA	1000 (cm ²)	0.003	0.0045	43

Los resultados se muestran en la Figura 33. En esta figura se puede observar cómo al ir incrementando el flujo másico los valores registrados de caída de presión se disparan para la celda con 43 canales ya que el valor más alto que se reporta está cerca de los 2000 Pa, mientras que en la celda de 20 canales no se llega a sobrepasar ni los 100 Pa.

Esta diferencia tan notable reafirma que entre mayor es el factor de escalado el grosor y la distancia de los canales se incrementa a tal medida que la caída de presión es muy baja. Por otro lado, el incremento proporcional de todas las dimensiones de la celda tiene un efecto en la geometría y campo de flujo interdigital, es decir afecta la división del caudal de flujo en un gran número de regiones de reacción afectando negativamente los tiempos de residencia y la transferencia de masa en el electrodo.

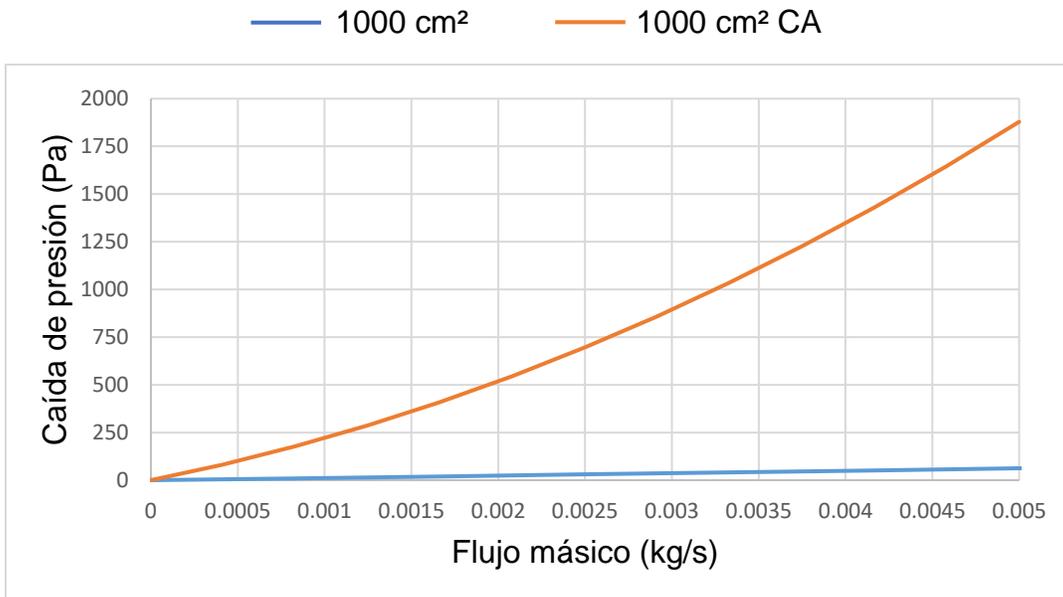


Figura 33. Caída de presión en función del flujo másico en celdas de 1000 cm².

Conclusiones.

- i. Los recursos renovables, son alternativas posibles para la solución de problemas como la escasez de combustibles fósiles y la contaminación ambiental. Sin embargo, debido a la demanda energética continua y la naturaleza fluctuante de las energías renovables, se requiere de sistemas viables de almacenamiento de energía.
- ii. Las baterías de flujo redox prometen ser una opción a futuro para el almacenamiento de energía a gran escala, debido a que la energía se determina por el volumen y la concentración del electrolito, mientras que la potencia está determinada por el tamaño de la pila. Las ventajas de las RFB, son que tienen una larga vida útil, bajo costo de operación y diseño ajustable.
- iii. Para evitar valores de caída de presión elevados sin redimensionar la celda se deberá trabajar con flujos comprendidos entre los 10 – 100 cm³/min.
- iv. Además se puede afirmar que para realizar un escalado a la celda en busca de una celda con mayor área se deben manipular adecuadamente los parámetros para no afectar el efecto de la geometría interdigital. El rango de flujo volumétrico se debe adecuar para las áreas de sección transversal y así obtener buenos resultados de caída de presión. Lo anterior manteniendo una adecuada velocidad del fluido tanto en el electrodo como en los canales de distribución para evitar que se generen grandes zonas de estancamiento.
- v. Estas afirmaciones son fundamentales para la optimización de una batería de flujo redox, ya que nos dan la información necesaria para encontrar una correcta configuración para las condiciones a la frontera y de operación, lo cual era el objetivo principal de este trabajo.

Glosario.

CFD: Dinámica de fluidos computacional.

RFB: Batería de flujo redox.

VRFB: Batería de flujo redox de vanadio.

CRFB: Batería de flujo redox comercial.

CFR: Celda de flujo redox.

DTR: Distribución de tiempos de residencia.

SFF: Campo de flujo en serpentín.

IFF: Campo de flujo interdigital.

MDA: Modelo de dispersión axial.

MID: Modelo de dispersión con intercambio en zonas dinámicas y de estancamiento.

Bibliografía.

- [1] Trevethan, M. (2020). Baterías de flujo redox de bajo costo con materiales orgánicos: Aspectos de ingeniería electroquímica. [Tesis de Licenciatura] Universidad Nacional Autónoma de México.
- [2] Leung, P. (2017). Recent developments in organic redox flow batteries: A critical review. *Journal of Power Sources*, 360, 243 - 283.
- [3] Centro de Investigación Económica y Presupuestaria, A.C. (2022). Medidas Fiscales Federales y Locales para la Ciudad de México. <https://ciep.mx/wp-content/uploads/2022/04/CDMX.pdf>, 05 de junio de 2022.
- [4] Global Solar Atlas. <https://globalsolaratlas.info/map?c=23.311991,-98.547363,6&r=MEX&s=13.859414,-121.376953&m=site>, 03 de mayo de 2022.
- [5] IEA (2003), *Renewables for Power Generation: Status and Prospects - 2003 Edition*, OECD Publishing, Paris, <https://doi.org/10.1787/9789264019195-en>, 03 de mayo de 2022.
- [6] Aparicio, G., Rodríguez, F., Cruz, M., Rivero, E. (2020). Patrón de flujo en una celda comercial de flujo redox utilizando una combinación de modelos de dispersión y CFD. *Avances en Ingeniería Química 1:2*, PRO 232-235. Memorias del XLI Encuentro nacional de la *Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química*.
- [7] Maurya, S., Nguyen, P., Kim, Y., Kang, Q., Mukundan, R. (2018). Effect of flow field geometry on operating current density, capacity and performance of vanadium redox flow battery. *Journal of Power Sources*, 404, 20 – 27.
- [8] Gundlapalli, R., Jayanti, S. (2020). Performance characteristics of several variants of interdigitated flow fields for flow battery applications. *Journal of Power Sources*, 467, 228225.
- [9] Aparicio, G., Rodríguez, F., Pijpers, J., Cruz, M., Rivero, E. (2020). CFD modeling of residence time distribution and experimental validation in a redox flow battery using free and porous flow. *Journal of Energy Storage*, 29, 101337.
- [10] González, A. (2018). Historia de la dinámica de fluidos computacionales. https://www.academia.edu/39320819/Historia_del_CFD
- [11] Fuel Cell Store, Flow battery flex stak. <https://www.fuelcellstore.com/>, 03 de mayo de 2022.
- [12] Newman, J., Thomas, K. (2004). *Electrochemical systems*. 3ª ed. Jhon Wiley & Sons. New York.

[13] You, X., Ye, Q., Chen, P. (2016). Scale-up of high power density redox flow batteries by introducing interdigitated flow fields. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 75, 7 – 12.

[14] MacDonald, M., Darling, R.M. (2019). Comparing velocities and pressures redox flow batteries with interdigitated and serpentine channels. *American Institute of Chemical Engineers*, 65, 5.

[15] Arenas, L., De León, P., Walsh, F. (2017). Engineering aspects of the design, construction and performance of modular redox flow batteries for energy storage. *Journal of Energy Storage*, 11, 119 - 153.

[16] Geankoplis, C. (2006). Procesos de transporte y principios de separación. 4ª ed. México: Compañía editorial continental. Indicar la ciudad de impresión.

[17] Solorio, G. Deducción de las ecuaciones de Navier-Stokes. <https://fim.umich.mx/teach/golorio/notas/Ec.%20de%20Navier%20Stokes.pdf>, 18 de noviembre 2021.